



Simulations numeriques dans la fabrication des circuits a semiconducteurs (Process modelling)

Americo Marrocco

► To cite this version:

Americo Marrocco. Simulations numeriques dans la fabrication des circuits a semiconducteurs (Process modelling). [Rapport de recherche] RR-0305, INRIA. 1984. inria-00076252

HAL Id: inria-00076252

<https://inria.hal.science/inria-00076252>

Submitted on 24 May 2006

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



CENTRE DE ROCQUENCOURT

Institut National
de Recherche
en Informatique
et en Automatique

Domaine de Voluceau
Rocquencourt
BP 105
78153 Le Chesnay Cedex
France
Tél. (3) 954 90 20

Rapports de Recherche

N° 305

**SIMULATIONS NUMÉRIQUES
DANS LA FABRICATION
DES CIRCUITS
A SEMICONDUCTEURS
(PROCESS MODELLING)**

Americo MARROCCO

Mai 1984

SIMULATIONS NUMERIQUES DANS LA FABRICATION DES CIRCUITS

A SEMICONDUCTEUR (PROCESS MODELLING).

AMERICO MARROCCO

(I.N.R.I.A. Rocquencourt).

RESUME. On présente dans cet article des méthodes de simulation numériques, de phénomènes intervenant dans différentes étapes technologiques de la fabrication des circuits intégrés au silicium. Ces simulations sont faites à l'aide d'éléments finis et méthodes itératives.

On fait tout d'abord une étude assez détaillée sur un problème modèle de diffusion d'une impureté. Différents algorithmes ont été élaborés et testés et de nombreux résultats numériques sont présentés.

On s'intéresse ensuite à la diffusion couplée de deux (ou plusieurs) impuretés et on généralise les algorithmes les plus performants élaborés lors de l'étape précédente. On envisage ensuite le problème de diffusion d'impuretés dans un milieu non-homogène, silicium et oxyde de silicium. Il faut tenir compte, lors de la modélisation, du phénomène de ségrégation qui se traduit par une discontinuité des concentrations d'impuretés à l'interface Si - SiO₂. L'approche par la technique des perturbations singulières permet d'utiliser avec profit les algorithmes développés antérieurement. On passe ensuite à la simulation numérique d'une étape très importante dans la fabrication des circuits intégrés : la diffusion d'impuretés due à une oxydation thermique localisée. L'approche choisie consiste à travailler dans le plan physique et l'on doit alors simuler des équations de diffusion couplées dans un domaine variable au cours du temps. Des résultats numériques relatifs à un exemple typique sont présentés.

Dans une dernière partie on donne quelques indications sur l'implantation ionique très utilisée dans la technologie moderne et pour laquelle on utilise souvent une approximation analytique. On donne aussi différentes formulations du système d'équations permettant de décrire le comportement électrique d'un composant élémentaire.



ABSTRACT. We present in this paper several numerical algorithms using finite elements and iterative techniques for the simulation of various steps in silicon process fabrication of integrated circuits.

We begin with a careful study of one impurity diffusion model. Various numerical algorithms have been derived and used ; numerical results are presented.

After we are interested with the numerical simulation of coupled diffusion of impurities and the best previous algorithms are generalized for this case.

We give also numerical results for the simulation of impurities diffusion in non homogeneous media : silicon and oxide. We have to take into account the segregation phenomena which leads to discontinuities at the Si - Si O₂ interface for the impurity concentration. A singular perturbation approach for the solution of this problem, allows us to use with benefit the previous algorithms.

We are after interested by the numerical simulation of a major step in modern process of silicon integrated circuits : thermal local oxidation. We choose to work in physical plane and this leads to numerical simulation of coupled diffusion equations within time variable domain. Numerical results related to a typical example are presented.

In the last part we give some information about ionic implant. An usual analytical approximation model is given. Different formulations for the set equations describing the electrical behaviour of a device are given.

SIMULATIONS NUMERIQUES DANS LA FABRICATION DES CIRCUITS A SEMICONDUCTEURS (PROCESS MODELLING)

0 - INTRODUCTION	1
I - DIFFUSION D'UNE IMPURETE DANS DU SILICIUM	9
1. Modèle pour la diffusion d'impuretés dans du silicium	9
1.1. Equations	10
1.2. Applications pratiques	13
2. Formulation du problème modèle - Approximation numérique	17
2.1. Approximation de la dérivée en temps	18
2.2. Formulation variationnelle à chaque pas de temps	20
3. Algorithmes de résolution	24
3.1. Algorithme 1 - Linéarisation	24
3.2. Algorithme 2 - Point fixe	25
3.3. Algorithme 3 - Variante itérative de linéarisation	25
3.4. Algorithme 4 - Relaxation non linéaire	26
3.5. Algorithme 5 - Newton-Raphson	27
3.6. Algorithme 6 - Variante itérative de Newton-Raphson	28
3.7. Une autre formulation du problème de diffusion non linéaire	28
3.8. Algorithme 8 - Newton Raphson sur formulation intégrale	30
3.9. Remarques	31
4. Expériences et résultats numériques	31
4.1. Présentation des problèmes traités	31
4.2. Maillages du domaine	32
4.3. Traitement de la condition au bord dans le cas du pré-dépôt	33
4.4. Choix du pas de temps et du paramètre de relaxation	34
4.5. Résultats numériques	35
4.6. Extension - Diffusion du phosphore	41
4.7. Validation des résultats	42
Figures	43

II - DIFFUSION COUPLEE DE DEUX IMPURETES	72
1. Formulation du problème - Equations	72
2. Approximation numérique - Formulation variationnelle	73
3. Algorithmes de résolution	74
3.1. Algorithme de linéarisation - Point fixe	75
3.2. Remarques	76
3.3. Algorithme de relaxation non linéaire par blocs	77
3.4. Algorithme lié à la formulation de Newton-Raphson	77
4. Experiences numériques - Résultats	80
Figures	86
III - DIFFUSION D'IMPURETES DANS Si et SiO ₂ - SEGREGATION	95
1. Présentation des problèmes	95
2. Approximation des problèmes	98
3. Résolution des problèmes par l'approche perturbations singulières	99
4. Expériences numériques	101
Figures	103
IV - DIFFUSION D'IMPURETES DURANT L'OXYDATION LOCALISEE	107
1. Introduction	107
2. Modèle physique	108
a - formation de l'oxyde	
b - diffusion des impuretés	
c - ségrégation	
3. Présentation des problèmes continus et discrets	109
4. Déformation de maillages	114
5. Résultats numériques	120
5.1. Test numérique 1 - (conservation de la dose dans le silicium)	120
5.2. Test numérique 2 - Simulation du problème réel	123

V - QUELQUES INDICATIONS SUR L'IMPLANTATION IONIQUE ET SUR L'ETUDE DU COMPORTEMENT ELECTRIQUE	140
1. Implantation ionique	140
2. Exemple de calcul	141
3. Quelques indications sur le device modelling	143

-- BIBLIOGRAPHIE	150
------------------	-----

INTRODUCTION

Les techniques de simulation numérique de dispositifs à semiconducteur connaissent depuis quelques années un regain considérable d'intérêt, en particulier de la part des fabricants de circuits intégrés silicium. En effet, la densité d'intégration (nombre de transistors par circuit) augmente de façon considérable dans l'industrie des circuits intégrés au silicium. Elle atteint déjà 10^5 et le million est au stade de la recherche et du développement. Cette "Very Large Scale Integration" (V.L.S.I.) ne peut être obtenue que par une réduction importante des dimensions géométriques du composant élémentaire de tels circuits, à savoir, le transistor MOS. Grâce aux nouvelles méthodes de lithographie et à l'amélioration des étapes élémentaires de la technologie planar, on a réussi à faire passer la longueur de canal (zone active du transistor) de $15\text{ }\mu\text{m}$ à $2\text{ }\mu\text{m}$ au stade industriel, voire à moins d'un micron dans les centres de recherche.

Les modèles analytiques (unidimensionnels) utilisés jusqu'alors par les concepteurs et les technologues, se sont malheureusement révélés caducs pour de tels "micro-MOS" et les progrès obtenus l'ont été souvent de façon empirique et aux prix de campagnes d'expériences très coûteuses.

Des effets physiques considérés jusqu'alors comme négligeables deviennent prépondérant, en particulier ceux dus à l'aspect géométrique. La forme des zones de source et drain par exemple, influe fortement sur les caractéristiques électriques du transistor (voir sur la figure 1, la coupe schématique d'un transistor MOS-VLSI). Un modèle réaliste doit, pour de tels dispositifs être bidimensionnel, voire tri-dimensionnel.

Deux grandes classes de problèmes vont se dégager au niveau de l'étude des composants élémentaires des circuits (chaque classe conduisant à des problèmes plus spécifiques selon la technologie utilisée ou l'étape de fabrication considérée ou selon le dispositif étudié) à savoir :

- les problèmes liés aux étapes de fabrication des circuits intégrés (PROCESS MODELLING)
- les problèmes liés au comportement électrique (caractéristique électrique) du composant élémentaire de tels circuits (DEVICE MODELLING).

Dans ce qui suit nous ne nous intéresseront essentiellement qu'à l'aspect PROCESS MODELLING et plus précisément à la simulation numérique de certaines étapes technologiques intervenant lors de la fabrication des circuits intégrés au silicium, et nous ne donnerons que quelques indications très succinctes en ce qui concerne les problèmes liés au DEVICE MODELLING.

Dans la technologie moderne de fabrication de transistors MOS on peut distinguer parmi les plus importantes les étapes suivantes.

- a) implantation ionique (ion implantation)
- b) prédépot d'impuretés (chemical prédéposition of dopants)
- c) redistribution en ambiance inerte (inert drive-in)
- d) oxydation thermique (thermal oxidation)
- e) epitaxie (epitaxial growth)
- f) gravure (etching)
- g) dépôt d'oxyde (ou autre matériau) (oxide deposition)

Certaines de ces étapes se passent à "froid" (a,f,g) et d'autres (b,c,d,e) à très haute température (1000°). Dans le deuxième cas, les impuretés se trouvant dans le dispositif vont diffuser et ce sont essentiellement les problèmes liés à cette diffusion que nous allons simuler numériquement.

On pourra voir sur les planches 1 à 3, les différentes étapes dans la technologie NMOS.

De même sur les planches 4 à 6 sont détaillés les différentes étapes pour la technologie C.MOS.

La publication de ces différents schémas s'est faite grâce à l'amabilité du CNET-CNS (Grenoble). D'ailleurs les travaux présentés ici ont été menés en étroite collaboration avec le CNET-CNS.

Bien entendu, pour la mise au point d'algorithmes pour la simulation numérique de diverses étapes du process de fabrication certaines simplifications seront nécessaires, tout au moins au début.

TECHNOLOGIE NMOS-CNS

CMAT
CENTRE
MATERIALS

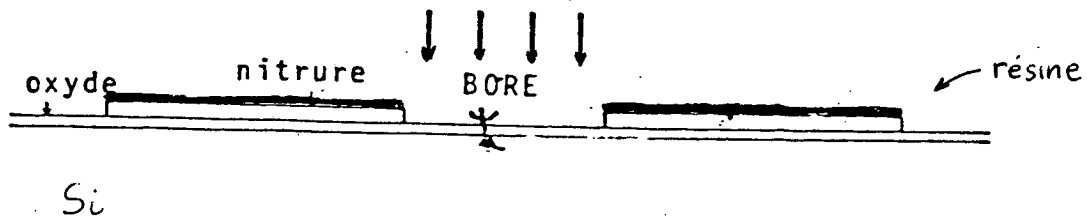
OXYDATION PRENITRURE

DEPOT DE NITRURE

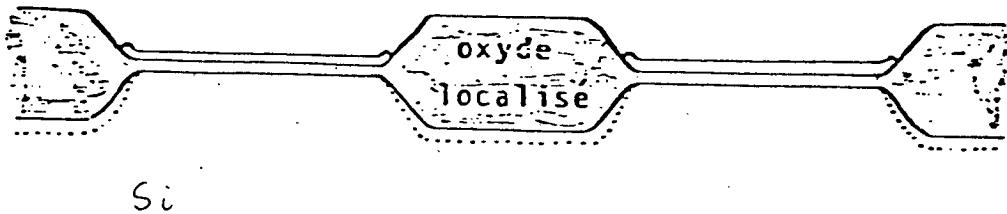
PHOTO 1.0 ← 1^{er} masque

GRAVURE NITRURE

IMPLANTATION DE BORE



OXYDATION LOCALISEE

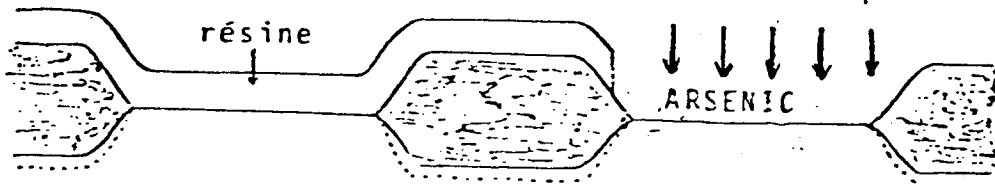


GRAVURE OXYDE.NITRURE.OXYDE (ONO)

PHOTO 2.0 ← 2^{eme} masque

IMPLANTATION DE ARSENIC

↳ Ajustement tension de seuil des TMOS en dépletion



retrait résine → sulfo-oxygéné à 175°C

dessinés par Maryse PAOLI

OXYDATION DE GRILLE

PHOTO 2.1

← 3^{eme} masque

GRAVURE OXYDE

← Procédé chimique (BOE)

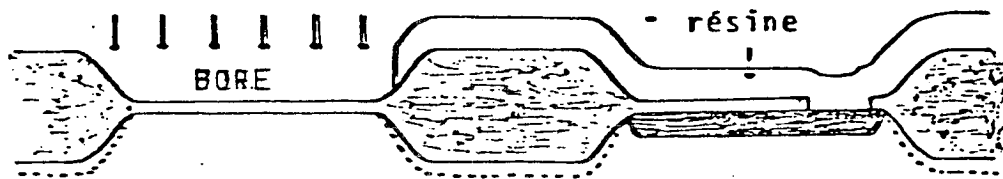


PHOTO 2.2

← 4^{eme} masque

(⇒ Ajustement V_T enrichis)

IMPLANTATION DE BORE



DEPOT DE SILICIUM POLYCRISTALLIN

DOPAGE DU SILICIUM POLYCRISTALLIN

← Diffusion dans les joints de grain

PHOTO 3.0

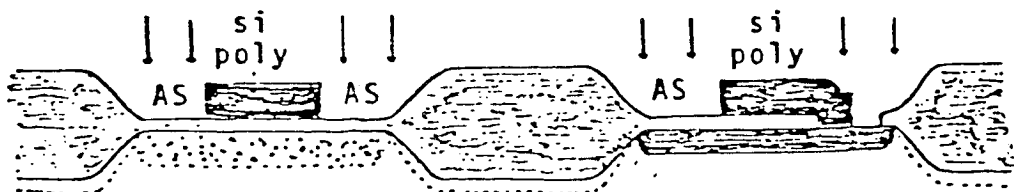
← 5^{eme} masque

(gravure poly)

GRAVURE DU SILICIUM

poly → plasma ; gaz : $SiF_6 + O_2$

IMPLANTATION D'ARSENIC



dessinés par Maryse PAOLI

C. D. T.

REOXYDATION DRAIN/SOURCE

PHOTO 4.1

GRAVURE OXYDE

← 6^{eme} masque
(BOE)



ringage , retrait résine , nettoyage $H_2SO_4 - H_2O$ (5mn)

• DEPOT VAPOX 1

GETTER

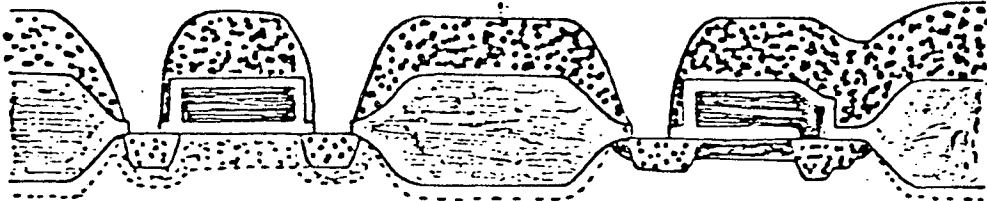
DEPOT VAPOX 2

PHOTO 4.2

GRAVURE VAPOX

← 7^{eme} masque

oxyde déposé (vapox)



↓ (Attaque HF dilué (OXYDE))

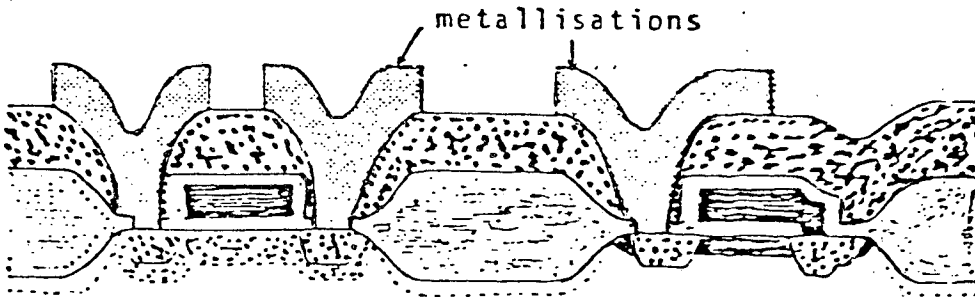
• DOPAGE DES CONTACTS

DEPOT D'ALUMINIUM (Sputtering)

PHOTO 5.3

GRAVURE ALUMINIUM

← 8^{eme} masque

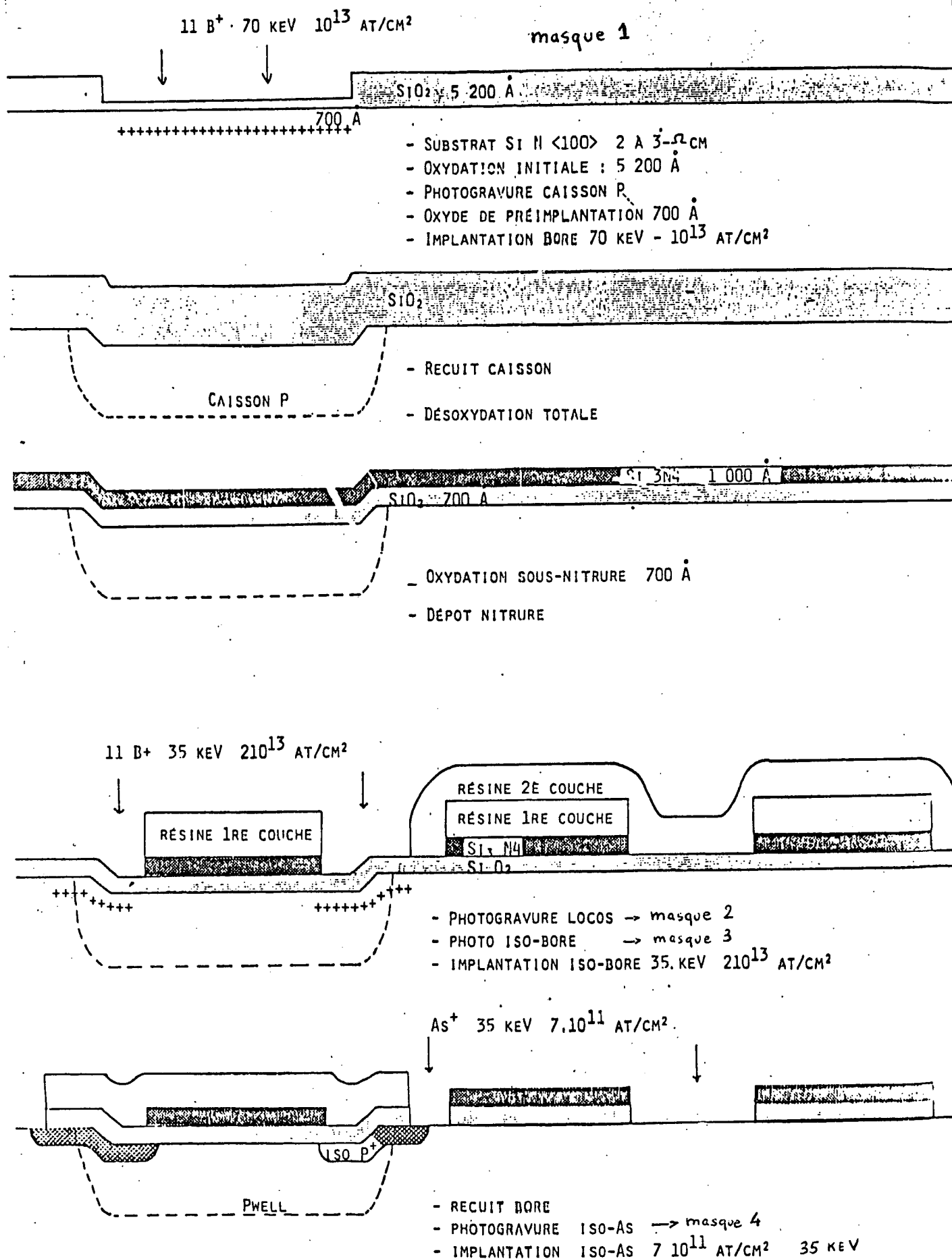


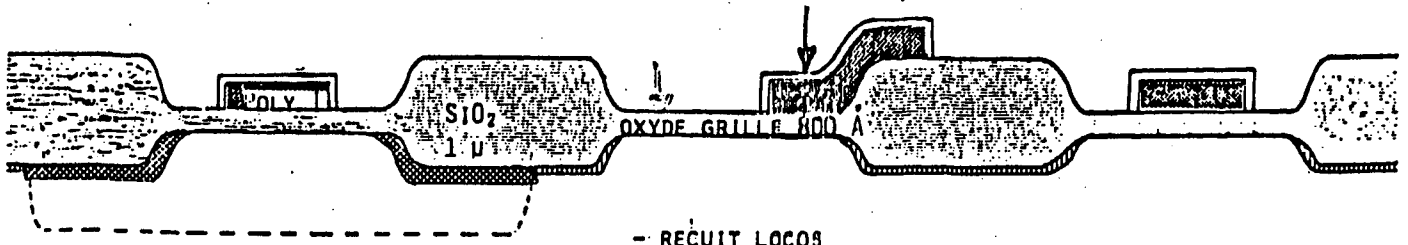
• RECUI ALU SOUS H_2, N_2

• DEPOT DE DIELECTRIQUE

• OUVERTURE PLOTS (← 9^{eme} masque)

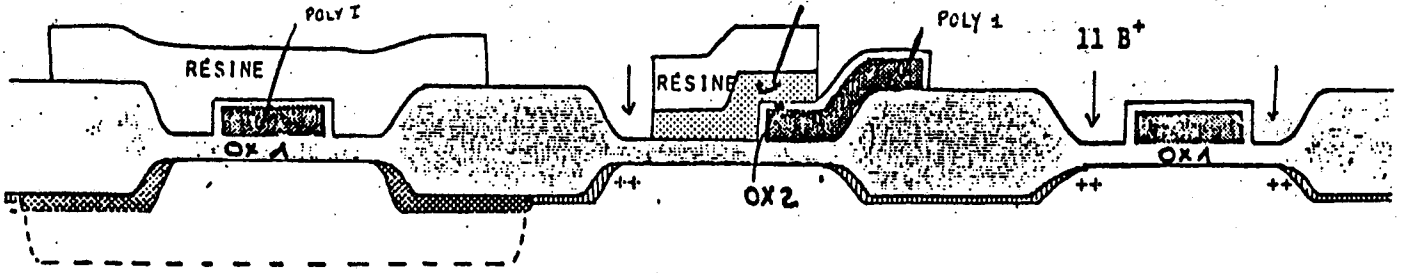
PLANCHE 3





- RECUIT LOCOS
- OXYDATION GRILLE I
- DÉPOT POLY I
- OXYDATION GRILLE II

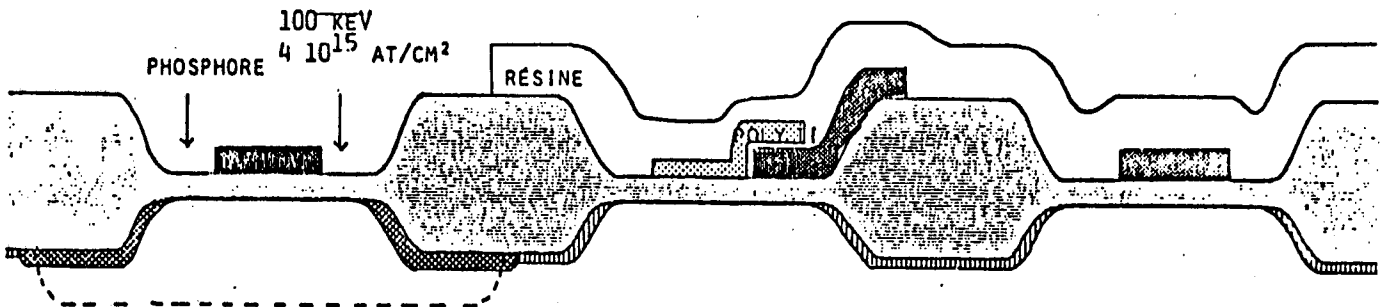
masque 5



- DÉPOT POLY II
- PHOTO DRAIN-SOURCE P
- IMPLANT DORE

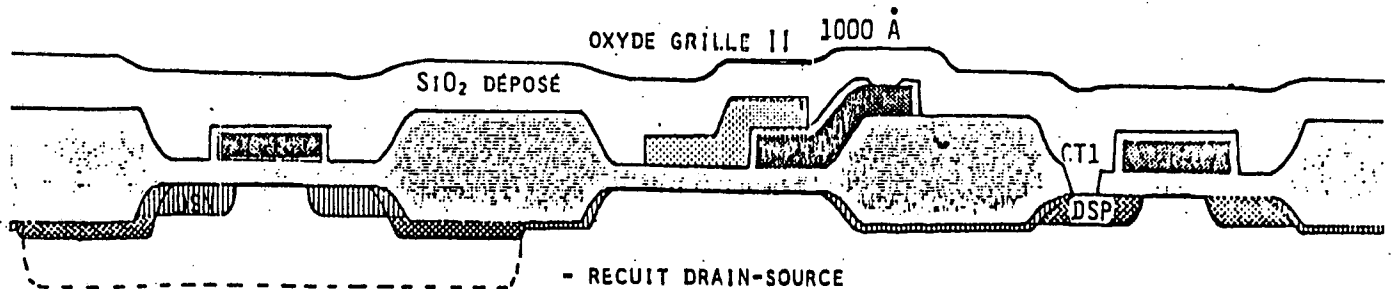
masque 6

masque 7



- PHOTO DRAIN-SOURCE N
- IMPLANTATION PHOSPHORE 100 KEV $4 \cdot 10^{15}$ AT/CM²

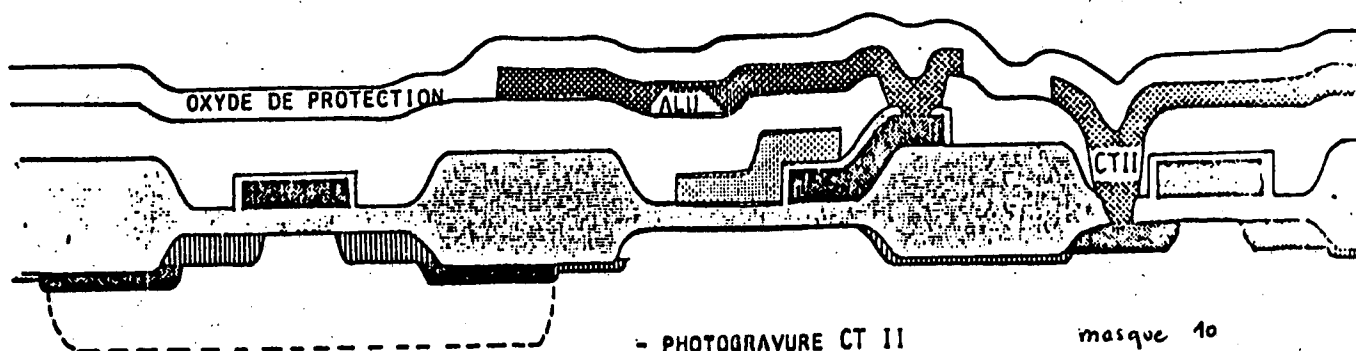
masque 8



- RECUIT DRAIN-SOURCE

- PHOTOGRAVURE CT1
- DÉPOT OXYDE LTO

masque 9



- PHOTOGRAVURE CT II
- DÉPOT ALU
- PHOTOGRAVURE ALU
- DÉPOT OXYDE DE PROTECTION
- GRAVURE DES PLOTS

masque 10

masque 11

masque 12

I - DIFFUSION D'UNE IMPURETE DANS DU SILICIUM

1 - Modèle pour la diffusion d'impuretés dans du Silicium

Si les mécanismes de la diffusion d'espèces dans un matériau cristallin sont relativement bien connus, de nombreuses questions restent ouvertes quant à la modélisation précise de la diffusion de dopants tels que l'arsenic, le bore, le phosphore dans le silicium. En effet la technologie a souvent précédé la physique et les concentrations d'impuretés obtenues actuellement sont voisines de la solubilité limite. Les modèles simples (Lois de Fick), corrects pour de faibles concentrations ne conviennent plus et l'on a dû rajouter de nombreux termes correctifs pour obtenir un modèle susceptible de donner des résultats quantitatifs valables dans le domaine des concentrations employées.

En particulier, aucune réponse n'est actuellement fournie sur le caractère lacunaire (l'impureté pénètre dans la matrice de silicium par occupation d'un site vide entre les noeuds du réseau) ou interstitiel d'une telle diffusion. Il s'agit vraisemblablement d'un mélange des deux processus dans une proportion qui reste à définir et qui dépend des conditions technologiques.

Néanmoins au niveau microscopique, plusieurs phénomènes ont été compris.

- Comme les impuretés sont chargées électriquement, la diffusion est accélérée, à haute concentration, par le champ électrique interne créé par le gradient de la distribution de dopants. Lorsque plusieurs impuretés diffusent en même temps, elles sont couplées par ce terme de "drift".

- Une autre augmentation de la diffusion à haute concentration d'impureté vient, (en supposant un mécanisme lacunaire), de ce que la concentration de lacunes varie avec la concentration d'impuretés.

- Enfin, à très haute concentration, en particulier pour l'arsenic, la solubilité limite peut-être dépassée. Le dopant peut alors précipiter et former des agglomérats (cluster) ou des molécules de $As_2 S_3$ par exemple. Ce phénomène se traduit par une chute brutale de la diffusion à très haute concentration (clustering).

Un des principaux avantages de l'emploi du Silicium sur les autres matériaux semi-conducteurs dans la réalisation de dispositifs électroniques est la possibilité d'utiliser la technologie "planar". L'oxyde de silicium (ou silice) est un masque presque parfait pour la diffusion d'impuretés. Il est donc possible en oxydant la plaquette de silicium et en gravant une partie de la couche de silice obtenue en surface d'effectuer des diffusions localisées. Dans ce domaine à deux indices, la continuité des potentiels chimiques

conduit à une condition d'interface du type discontinuité sur les concentrations dans les deux milieux. On reviendra plus tard sur ce phénomène qui est connu sous le nom de ségrégation.

Les corrections précédentes ont permis de définir un modèle physique de la diffusion qui rend compte de façon très correcte des profils de dopage dans presque tous les cas technologiques rencontrés, mais les recherches dans ce domaine continuent.

1.1 - Equations

Si on note \vec{J}_e le flux de l'impureté e, alors ce flux peut être écrit comme la somme de deux termes :

$$(1.1) \quad \vec{J}_e = - D_e \vec{\nabla} C_e + z_e \mu_e C_e \vec{E}$$

où

D_e est le coefficient de diffusion de l'impureté e

C_e est la concentration de l'impureté e

μ_e est la mobilité

\vec{E} est le champ électrique interne

z_e est la charge de l'impureté e et vaut ± 1

Si on note ψ le potentiel électrostatique dans la structure, le champ électrique \vec{E} est alors donné par

$$(1.2) \quad \vec{E} = - \vec{\nabla} \psi$$

La loi de conservation s'écrit, dans le cas où il n'y a pas de terme source à l'intérieur de la structure,

$$(1.3) \quad \frac{\partial C_e}{\partial t} = - \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_e$$

La thermodynamique permet de relier le coefficient de diffusion D_e à la mobilité μ_e par l'intermédiaire de la relation d'Einstein

$$(1.4) \quad \frac{D_e}{\mu_e} = \frac{k T}{q}$$

avec k : constante de Boltzman

T : température absolue (en K°)

q : est la charge de l'électron

Comme on le verra par la suite ces paramètres n'interviendront pas directement dans la formulation du problème de diffusion :

Utilisant (1.2) et (1.4) on peut réécrire (1.1) comme suit :

$$(1.5) \quad \vec{J}_e = - D_e \left(\vec{\nabla} C_e + \frac{q z_e}{k T} C_e \vec{\nabla} \psi \right)$$

Prenant en considération la différence existant entre les constantes de temps relatives à la diffusion d'impuretés ($\sim 10^{-11}$ s) et de porteurs de charges ($\sim 10^{-14}$ s), les hypothèses suivantes sont souvent admises :

- a) - la densité globale de charges est nulle
- b) - les populations d'électrons et de trous sont à l'équilibre thermodynamique et obéissent à une statistique de Boltzman.

Si l'on note, comme on le fait habituellement par n la concentration (ou densité) d'électrons et par p celle de trous, alors l'hypothèse a) conduit à écrire :

$$(1.6) \quad \sum_j z_j C_j + p - n = 0$$

La somme en j étant faite sur toutes les impuretés présentes dans la structure.

Si on note n_i la concentration intrinsèque d'électrons à la température considérée, l'hypothèse b) donne :

$$(1.7) \quad p \cdot n = n_i^2 = \text{constante}$$

et

$$(1.8) \quad n = n_i \exp \left(\frac{q \psi}{k T} \right)$$

(1.6) et (1.7) donnent

$$n^2 - \left(\sum_j z_j C_j \right) n - n_i^2 = 0$$

d'où l'on tire

$$(1.9) \quad n = \frac{1}{2} \left(\sum_j z_j C_j + \sqrt{\left(\sum_j z_j C_j \right)^2 + 4 n_i^2} \right)$$

$$(1.10) \quad p = \frac{1}{2} \left(- \sum_j z_j C_j + \sqrt{\left(\sum_j z_j C_j \right)^2 + 4 n_i^2} \right)$$

(1.8) donne évidemment

$$(1.11) \quad \psi = \frac{k T}{q} \log \left(\frac{n}{n_i} \right)$$

En reportant dans (1.5) on obtient

$$(1.12) \quad \vec{J}_e = - D_e \left(\vec{\nabla} C_e + z_e C_e \vec{\nabla} \left(\log \frac{n}{n_i} \right) \right)$$

avec n donné par (1.9)

D'où, compte tenu des hypothèses précédentes, on peut exprimer le flux \vec{J}_e en fonction des impuretés présentes ;

Si on note

$$N = \frac{n}{n_i}$$

$$\text{alors } \vec{\nabla} (\log N) = \frac{\vec{\nabla} N}{N}$$

et l'opération de dérivation étant une opération linéaire, on obtiendra

$$(1.13) \quad \vec{J}_e = - D_e \left[\vec{\nabla} C_e + z_e C_e \frac{\sum z_j \vec{\nabla} C_j}{\sqrt{(\sum z_j C_j)^2 + 4 n_i^2}} \right]$$

Regardons maintenant comment est pris en compte l'influence des différents types de lacunes dans la définition du coefficient de diffusion D_e . Les lacunes (absence d'un atome de S_i sur un site du réseau cristallin) peuvent se présenter sous différents états électriques : lacunes neutres, chargées positivement, négativement, etc....

Le coefficient de diffusion D_e est alors la somme de divers coefficients de diffusion tenant compte de la diffusion de l'impureté avec chacune de ces lacunes.

$$(1.14) \quad D = D^{\circ} + D^{-} + D^{\bar{}} + D^{+} + \dots$$

En normalisant ces différents coefficients de diffusion par rapport au coefficient de diffusion intrinsèque D_i qui correspond au cas de la diffusion à faible concentration ($C_e \ll n_i$) et en supposant que la diffusion ne s'effectue pour les donneurs (par exemple) que par l'intermédiaire des lacunes neutres et chargées négativement (deux premiers termes dans 1.14), on obtient

$$(1.15) \quad D_d = D_{id} \frac{1 + \beta_d \frac{n}{n_i}}{1 + \beta_d}$$

(l'indice d indiquant que l'on considère les impuretés donatrices $z_e > 0$, telles que l'Arsenic, le phosphore) avec

$$\beta_d = \frac{D^{-}}{D^{\circ}}$$

On aura de même pour les impuretés acceptrices telles que le Bore ($z_e < 0$), la relation

$$(1.16) \quad D_a = D_{ia} \frac{1 + \beta_a \frac{p}{n_i}}{1 + \beta_a}$$

Regroupant toutes ces informations nous obtenons pour l'expression du flux de l'impureté e :

$$(1.17) \quad \vec{J}_e = - D_{ie} \frac{1 + \beta_e f}{1 + \beta_e} \left[\vec{\nabla} C_e + z_e C_e \frac{\sum z_j \vec{\nabla} C_j}{\sqrt{(\sum z_j C_j)^2 + 4 n_i^2}} \right]$$

D_{ie} est le coefficient de diffusion intrinsèque de l'impureté e

$f = \frac{n}{n_i}$ pour une impureté donneuse ($z_e > 0$, A, p_h)

$f = \frac{p}{n_i}$ pour une impureté acceptrice ($z_e < 0$, B)

Le clustering est pris en compte de façon suivante :

on remplace la concentration C_e totale de l'impureté e par une concentration "effective" N_e d'atomes susceptibles de se mouvoir dans le silicium.

La relation N_e en fonction C_e est obtenue de façon empirique par

$$(1.18) \quad N_e = \frac{C_e}{\left[1 + \left(\frac{C_e}{NM_e} \right)^{\alpha_e} \right]^{1/\alpha_e}}$$

où α_e et NM_e sont des paramètres de lissage dépendant de la température

1.2 - Application pratiques

La réalisation d'un transistor nécessite la présence de deux types d'impuretés : des donneurs et des accepteurs.

Pour cette première approche nous considérons le cas où une seule impureté est diffusante, l'autre étant considérée comme fixe ; c'est ce qui se passera, en première approximation, dans la pratique, lorsque l'on considère, par exemple la pré-déposition d'Arsenic ($z_e > 0$), (ou la redistribution après implantation ionique), dans du silicium uniformément dopé (faible valeur) en bore ($z_e < 0$). (On peut évidemment tout aussi bien considérer la pré-déposition de bore, ou bien la redistribution dans du silicium dopé en Arsenic).

Nous noterons C_A la concentration en arsenic et C_B la concentration en bore dans la structure étudiée.

Si on considère le cas où une seule impureté est "active", (1.17) donne alors (par exemple si l'impureté Arsenic est active)

$$(1.19) \quad \vec{J}_A = - D_{iA} \frac{1 + \beta_A \frac{n}{n_i}}{1 + \beta_A} \left(1 + \frac{C_A}{\sqrt{(C_A - C_B)^2 + 4 n_i^2}} \right) \vec{\nabla} C_A$$

avec n donné par

$$(1.20) \quad n = \frac{1}{2} \left[(C_A - C_B) + \sqrt{(C_A - C_B)^2 + 4n_i^2} \right]$$

Il est plus commode pour les calculs d'utiliser les concentrations normalisées (coefficient de normalisation n_i) définies par

$$(1.21) \quad \begin{cases} \bar{C}_A = \frac{C_A}{n_i} \\ \bar{C}_B = \frac{C_B}{n_i} \end{cases}$$

alors

$$(1.22) \quad N = \frac{n}{n_i} = \frac{1}{2} \left((\bar{C}_A - \bar{C}_B) + \sqrt{(\bar{C}_A - \bar{C}_B)^2 + 4} \right)$$

La loi de conservation (1.3) pour l'impureté Arsenic s'écrit :

$$(1.23) \quad \frac{\partial \bar{C}_A}{\partial t} = \nabla \cdot \left[D_{iA} \frac{1 + \beta_A N}{1 + \beta_A} \left(1 + \frac{\bar{C}_A}{\sqrt{(\bar{C}_A - \bar{C}_B)^2 + 4}} \right) \nabla \bar{C}_A \right]$$

avec N donné par (1.22)

De même on obtiendrait si c'était l'impureté Bore qui diffusait

$$(1.24) \quad \frac{\partial \bar{C}_B}{\partial t} = \nabla \cdot \left[D_{iB} \frac{1 + \beta_B \left(\frac{1}{N} \right)}{1 + \beta_B} \left(1 + \frac{\bar{C}_B}{\sqrt{(\bar{C}_A - \bar{C}_B)^2 + 4}} \right) \nabla \bar{C}_B \right]$$

On voit donc apparaître dans les équations de diffusion (1.23) ou (1.24) un coefficient de diffusion dépendant des concentrations des impuretés présentes dans le dispositif

$$(1.25) \quad D_A(\bar{C}_A, \bar{C}_B) = D_{iA} \frac{1 + \beta_A \left\{ \frac{1}{2} \left[(\bar{C}_A - \bar{C}_B) + \sqrt{(\bar{C}_A - \bar{C}_B)^2 + 4} \right] \right\}}{1 + \beta_A} \left(1 + \frac{\bar{C}_A}{\sqrt{(\bar{C}_A - \bar{C}_B)^2 + 4}} \right)$$

$$(1.26) \quad D_B(\bar{C}_A, \bar{C}_B) = D_{iB} \frac{1 + \beta_B \left\{ \frac{1}{\frac{1}{2} \left[(\bar{C}_A - \bar{C}_B) + \sqrt{(\bar{C}_A - \bar{C}_B)^2 + 4} \right]} \right\}}{1 + \beta_B} \left(1 + \frac{\bar{C}_B}{\sqrt{(\bar{C}_A - \bar{C}_B)^2 + 4}} \right)$$

En fait (1.26) est analogue à (1.25) car on peut réécrire

$$D_B(\bar{C}_A, \bar{C}_B) = D_{iB} \frac{1 + \beta_B \left\{ \frac{1}{2} \left[(\bar{C}_B - \bar{C}_A) + \sqrt{(\bar{C}_B - \bar{C}_A)^2 + 4} \right] \right\}}{1 + \beta_B} \left(1 + \frac{\bar{C}_B}{\sqrt{(\bar{C}_B - \bar{C}_A)^2 + 4}} \right)$$

Si l'on tient compte du phénomène clustering donné par la formule (1.18), alors la loi de conservation (1.23) ou (1.24) s'écrit

$$(1.27) \quad \frac{\partial C_e}{\partial t} = \nabla \cdot (D_e(N_e) \nabla N_e)$$

c'est à dire, si l'on explicite en fonction de C_e (impureté diffusante)

$$(1.28) \quad \frac{\partial C_e}{\partial t} = \nabla \cdot \left(D_e [N_e] \frac{dN_e}{dC_e} \nabla C_e \right)$$

On voit donc comment est modifié le coefficient de diffusion de façon à prendre en compte le clustering.

En récapitulant on voit donc que le coefficient de diffusion est fonction de la concentration de l'espèce diffusante mais aussi dépend d'autres paramètres, et on pourra définir les familles de fonctions

$$(1.29) \quad C_A \rightsquigarrow D_{C_B, D_i, \beta, \alpha, NM} (C_A)$$

De même pour certains algorithmes de résolution, on verra qu'il sera utile de connaître la dérivée ou la primitive de la fonction définie en (1.29)

$$(1.30) \quad C_A \rightsquigarrow D'_{C_B, D_i, \beta, \alpha, NM} (C_A)$$

et

$$(1.31) \quad C_A \rightsquigarrow \gamma_{C_B, D_i, \beta, \alpha, NM} (C_A) = \int_0^{C_A} D_{C_B, D_i, \beta, \alpha, NM} (u) du$$

Ces différentes fonctions sont représentées sur les figures 8 à 27.

Il est de même intéressant de représenter les fonctions des 2 variables (concentration C_A et C_B) ; celles ci sont représentées sur les figures 28 à 34.

La fonction γ donnée en (1.31) peut être calculée de façon analytique (voir annexe 1).

Le coefficient de diffusion intrinsèque D_i , dépend évidemment de l'impureté considérée (A_s ou B), mais aussi de la température T du process.

La dimension de ce coefficient est : $\frac{\text{surface}}{\text{temps}}$, et nous avons choisi pour unités

le micron et l'heure. Ainsi les valeurs de D_i que figurent sur les dessins sont exprimés en $\mu\text{m}^2 / \text{h}$.

On peut trouver dans la littérature, une expression analytique donnant D_i en fonction de la température, ainsi pour l'Arsenic

$$(1.32) \quad D_{i, A_s} = 8.244 \cdot 10^{12} \cdot e^{[-47579.92 / (T+273)]}$$

et pour le bore

$$(1.33) \quad D_{i,b} = 1.9992 \cdot 10^{11} e^{[-39754.19 / (T+273)]}$$

avec T, température du process en degrés C.

De même les paramètres β dans (1.23) et (1.24) (sans dimensions) sont fournis dans la littérature et si la plupart des auteurs semblent d'accord $\beta = 100$ en ce qui concerne l'Arsenic, la valeur de β pour le Bore semble moins établie ; certains prennent 3 d'autres 19. (La valeur retenue est 3).

Pour la simulation du clustering par la formule (1.18) donnant la concentration effective N_e en fonction de la concentration réelle C_e , il est intéressant de voir comment agissent les paramètres NM et α .

Sur les figures 2 à 7, on a représenté des courbes $N_e(C_e)$ pour différentes valeurs de NM, α étant fixé.

Sur les figures 8 à 11, on a représenté la variation du coefficient de diffusion en fonction de la concentration normalisée d'impuretés (donnée par 1.21) et pour les températures 800, 900, 1000, 1100, et 1200 degrés C. (la courbe en trait épais correspond à la première valeur : 800°). Les figures 8 à 11 correspondent au coefficient de diffusion de l'Arsenic ; sur la figure 8, on ne tient pas compte du clustering, et la concentration en bore est 10^{-4} (normalisée). Sur la figure 9 cette concentration vaut 17,6 (correspondant à une concentration réelle $\sim 10^{21}$). Sur les figures 10 et 11, on tient compte du clustering avec pour paramètre $\alpha = 1.2$ et NM = 100.

Sur les figures 12 à 19 nous allons voir comment réagit la courbe donnant le coefficient de diffusion lorsque l'on fait varier un paramètre.

Sur la figure 12 on fait varier la concentration en bore C_B (le clustering n'est pas pris en compte).

Sur la figure 13 : analogue à la figure 12 mais avec clustering.

Sur la figure 14 : on fait varier la valeur de β (pas de clustering).

Sur la figure 15 : on fait varier la valeur de β (clustering).

Sur les figures 16 et 17 on reprend le contexte des figures 14 et 15 mais avec une concentration en bore plus forte ($C_B = 17,6$ au lieu de 10^{-4}).

Sur les figures 18 et 19 sont représentées les actions de α et NM pour la prise en compte du clustering.

La figure 20 est l'analogue de la figure 8 mais pour le Bore en tant qu'impureté diffusante. On constate que pour une température donnée, le coefficient de

diffusion du bore est plus élevé que celui de l'Arsenic. La figure 21 donne les courbes analogues à celles de la figure 20 lorsqu'on prend en compte le clustering (bien que dans la pratique il ne semble pas y avoir de clustering pour le bore).

Sur les figures 22, 23, 24 nous représentons la fonction donnée par (1.30) ; la courbe en pointillés correspond au cas où il n'y a pas de clustering ($\sim NM = \infty$, $\alpha = 1$).

Sur la figure 22, la concentration en l'autre impureté est 10^{-4} , celle ci vaut 1.76 sur la figure 23 et 17.6 sur la figure 24.

Les figures 25, 26, 27 reprennent les conditions des figures 22, 23, 24 mais cette fois pour la fonction donnée par (1.31) (primitive du coefficient de diffusion)

Si dans (1.29), (1.30), (1.31), on favorise le paramètre C_B en le considérant comme une variable, on obtient alors des fonctions de 2 variables que l'on peut représenter dans \mathbb{R}^3 et obtenir des vues perspectives données sur les figures 28 à 34.

Sur la figure 28, on représente $D(C_A, C_B) = Z(X, Y)$; les bornes sur les variables X et Y sont en concentrations réelles et non normalisées (comme sur les figures précédentes).

Les figures 28 et 30 donnent le coefficient de diffusion, avec ou sans clustering ; les figures 31 et 32 représentent des dérivées (par rapport à la variable diffusante) et les figures 33 et 34 des primitives.

2 - Formulation du problème modèle - Approximation numérique

Dans ce paragraphe nous n'allons nous intéresser qu'au cas où une seule impureté diffuse (c'est une première approximation, qui est fondée dans la pratique dans le cas où la ou les autres impuretés présentes sont en faible concentration).

Nous allons simuler deux étapes technologiques différentes à savoir :

a) le prédépot :

Du point de vue pratique cela revient à imposer la valeur de la concentration de l'impureté diffusante sur une partie de la frontière du silicium (condition de Dirichlet non homogène).

Sur les autres parties de la frontière, on imposera que le flux de l'impureté soit nul, ce qui correspond à une condition de Neumann homogène.

b) la redistribution :

Une solution initiale étant donnée (obtenue soit par implantation ionique, soit par un prédépot), les conditions aux limites qu'il faut imposer à la frontière du silicium sont de type flux nul ; on empêche que les impuretés puissent sortir du

domaine considéré soit par les conditions naturelles de symétrie, soit artificiellement en déposant une couche d'oxyde (qui se comporte comme une barrière).

Ces deux étapes technologiques sont réalisées à haute température ce qui fait qu'il y a migration des impuretés dans le silicium, selon la loi donnée en (1.3) ; la seule différence entre ces deux étapes provenant seulement des conditions aux limites imposées à la frontière du domaine de calcul (le silicium). Dans la pratique ces deux étapes différentes du process pourront être simulées par un même logiciel.

Si C est la concentration de l'impureté diffusante, elle satisfait (Ω représente le domaine de calcul)

$$(2.1) \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial C}{\partial t} - \nabla \cdot (D(C) \nabla C) = 0 \quad \text{dans } \Omega \\ + \text{conditions aux limites} \\ + \text{condition initiale} \end{array} \right.$$

(2.1) est une équation de diffusion non linéaire classique et sera approchée de la façon standard habituelle.

On discrétise la dérivée en temps par une méthode de différences finies qui transforme le problème parabolique (2.1) en une suite de problème elliptiques (ne faisant plus intervenir que des dérivées par rapport aux variables d'espace). Ces problèmes elliptiques sont ensuite exprimés sous forme variationnelle et approchés par la méthode des éléments finis.

2.1 - Approximation de la dérivée en temps

La discrétisation en temps revient à ne calculer la solution du problème (2.1) qu'à des temps $t^0, t^1, t^2, \dots, t^n, \dots, T$, de l'intervalle de temps considéré.

On notera $\tau_n = (t^n - t^{n-1})$ le $n^{\text{ième}}$ intervalle de temps ($n=1,2,3,\dots$), et on notera C^n la solution (concentration) au temps t^n . (Noter que l'on connaît C^0 : condition initiale dans 2.1)

On peut envisager différents schémas en temps :

a) Le schéma EXPLICITE

$$(2.2) \quad \frac{\partial C}{\partial t} \rightsquigarrow \frac{C^n - C^{n-1}}{\tau_n} \quad \text{et les autres termes dans l'équation évalués au temps "n-1"}$$

Ce schéma est du premier ordre et n'est pas toujours stable.

La condition de stabilité est facile à établir dans le cas d'un problème de diffusion linéaire, elle relie le pas de discrétisation h en espace et le pas de discrétisation en temps, au coefficient de diffusion. Dans le cas non linéaire cela dépendra du problème traité.

Nous n'avons donné ce schéma que par pure information, nous ne l'avons pas utilisé dans nos simulations.

b) Le schéma IMPLICITE

$$(2.3) \quad \frac{\partial C}{\partial t} \rightsquigarrow \frac{C^n - C^{n-1}}{\tau_n} \quad \text{et les autres termes dans l'équation évalués au temps "n"}$$

Ce schéma est toujours du premier ordre en temps mais est inconditionnellement stable. Le schéma (2.2), connaissant C^{n-1} , donne de façon "explicite" la valeur de la concentration au temps C^n . Le schéma (2.3), lui ne donne pas directement la solution au temps "n", mais celle-ci s'obtient, comme nous le verrons plus loin, par la résolution d'un problème non linéaire.

Ce schéma implicite a effectivement été utilisé pour nos simulations numériques. Pour avoir un schéma plus précis en temps on peut songer à utiliser le

c) Schéma de Crank-Nicholson

qui est un cas particulier d'une famille de schéma (θ schéma) allant du schéma implicite ($\theta=0$) au schéma explicite ($\theta=1$).

Le schéma de Crank-Nicholson correspond au cas $\theta = \frac{1}{2}$.

$$(2.4) \quad \frac{\partial C}{\partial t} \quad \text{évalué au temps } n-\frac{1}{2} \quad \text{par} \quad \frac{C^n - C^{n-1}}{\tau_n}$$

et les concentrations intervenant dans les autres termes évalués par $\frac{1}{2} (C^n + C^{n-1})$

En fait pour différentes raisons, nous lui avons préféré le schéma de GEAR d'ordre 2.

d) Schéma de GEAR

En général ce schéma est plus robuste que le schéma de Crank-Nicholson pour les problèmes non linéaires.

De plus l'extension des algorithmes à partir du schéma IMPLICITE est beaucoup plus aisé pour le schéma de GEAR que pour le schéma de Crank-Nicholson.

Le schéma de GEAR (à pas variable) consiste à remplacer

$$(2.5) \quad \frac{\partial C}{\partial t} \quad \text{par} \quad \left[\frac{2 \tau_{n+1} + \tau_n}{\tau_{n+1}(\tau_n + \tau_{n+1})} C^{n+1} - \frac{\tau_n + \tau_{n+1}}{\tau_n \tau_{n+1}} C^n + \frac{\tau_{n+1}}{(\tau_{n+1} + \tau_n) \tau_n} C^{n-1} \right]$$

au temps $(n+1)$, les autres termes étant aussi évalués en $(n+1)$.

Ce schéma pose un problème de "démarrage" car la formule générale (2.5) fait intervenir 2 pas de temps ; dans la pratique on amorce le processus par une étape de schéma implicite par exemple.

(2.5) redonne évidemment le schéma de GEAR classique donné par

$$(2.6) \quad \frac{3}{2} \left(\frac{C^{n+1} - C^n}{\tau} \right) - \frac{1}{2} \left(\frac{C^n - C^{n-1}}{\tau} \right)$$

lorsque le pas de temps τ est constant.

2.2 - Formulation variationnelle à chaque pas de temps

Après discrétisation en temps par l'un des schémas précédents, nous avons à chaque étape de temps, un problème de type elliptique non linéaire à résoudre, dont une formulation variationnelle peut s'écrire : (classique)

$$(2.7) \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } c \in \mathcal{V} \text{ tel que} \\ \int_{\Omega} C \cdot \varphi \, dx + \mu \int_{\Omega} D(c) \nabla C \cdot \nabla \varphi \, dx = \int_{\Omega} f \cdot \varphi \, dx \quad \forall \varphi \in \mathcal{V}_0 \end{array} \right.$$

où \mathcal{V} peut être pris comme un sous espace de l'espace de Sobolev $H^1(\Omega)$, prenant en compte les conditions aux limites et où \mathcal{V}_0 est l'espace associé aux fonctions tests, (correspondant aux conditions aux limites homogènes); μ est une constante positive dépendant du pas de temps (et du schéma de discrétisation en temps utilisé) ; f est une fonction connue.

Pour résoudre numériquement le problème (2.7), on l'approche tout d'abord par la méthode des éléments finis, qui conduira à un problème à un nombre fini d'inconnues (Pb non linéaire dans \mathbb{R}^p) ; on verra ensuite différents algorithmes permettant la résolution de ce problème discret.

Nous prendrons pour approcher le problème (2.7) la méthode des éléments finis, avec les éléments finis les plus simples ; à savoir, les éléments finis lagrange P1 conformes ; cela revient à se donner (ou à construire) tout d'abord un maillage de Ω à l'aide de triangles et à dire (ou imposer) que la concentration est une fonction continue, et dont la variation est linéaire sur chaque triangle (élément). On construit de la sorte un espace de dimension finie approchant \mathcal{V} (et \mathcal{V}_0).

Il est classique de noter \mathcal{V}_h (et \mathcal{V}_{0h}) les sous-espaces et aussi le problème discret revient à :

$$(2.8) \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{trouver } C_h \in \mathcal{V}_h \text{ tel que} \\ \int_{\Omega_k} C_k \cdot \varphi \, dx + \mu \int_{\Omega_k} \mathcal{D}(C_k) \nabla C_k \cdot \nabla \varphi \, dx = \int_{\Omega_k} f \cdot \varphi \, dx \quad \forall \varphi \in \mathcal{V}_{0,h} \end{array} \right.$$

Par la suite nous omettrons l'indice h , même lorsque nous parlerons du problème discret.

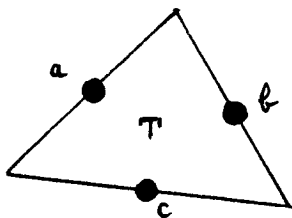
Si on regarde d'un peu plus près (2.8), l'intégrale sur Ω_h , se décompose en une somme sur les triangles d'expressions du même type ; aussi on aura à évaluer

$$(2.9) \quad \int_T C_k \cdot \varphi \, dx$$

$$(2.10) \quad \int_T \mathcal{D}(C_k) \nabla C_k \cdot \nabla \varphi \, dx \quad , \text{ où } T \text{ est un triangle du maillage}$$

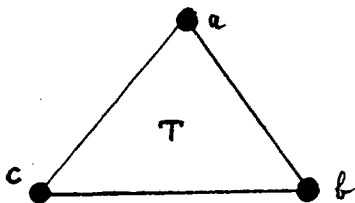
Si on considère (2.9), chaque terme de ce type contribue à ce qu'on appelle en terminologie éléments finis, la matrice de masse. Chaque fonction C_h et étant linéaire sur le triangle, le produit est quadratique et l'on sait intégrer exactement un polynôme du second degré sur un triangle. En fait pour préserver certaines propriétés de l'opérateur discrétisé de diffusion, on utilisera une formule d'intégration dite de mass-lumping conduisant à une matrice de masse diagonale.

a) Intégration exacte de (2.9)



$$\int_T C_k \cdot \varphi \, dx = \frac{\text{Aire}(T)}{3} \cdot [C_k(a) \varphi(a) + C_k(b) \varphi(b) + C_k(c) \varphi(c)]$$

b) Mass-lumping (2.9)



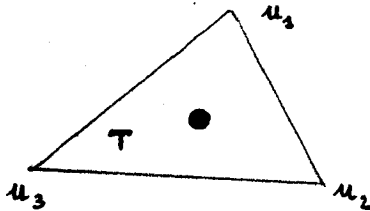
même expression, avec cette fois ci a, b, c sommets du triangle T

Si on considère (2.10), chaque terme de ce type contribue à ce qu'on appelle en éléments finis (et pour le cas linéaire) à la matrice de raideur. Vue l'approximation choisie pour les fonctions, ∇C_h et $\nabla \varphi$ sont constants sur chaque éléments et ne posent pas de problèmes d'intégration. Par contre l'évaluation de

$$(2.11) \quad \int_{\tau} D(C_R) dx$$

étant donné l'expression de D donnée en (1.25) par exemple, nécessitera l'utilisation d'intégration numérique. On peut trouver différentes formules plus ou moins précises dans la littérature (donnons les plus classiques)

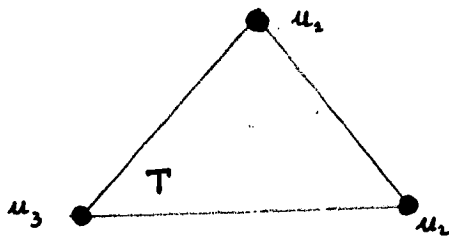
c) formule à 1 point ($O(h^2)$)



Calcul approché de $\int_{\tau} f(u) dx$ avec u variant linéairement sur τ

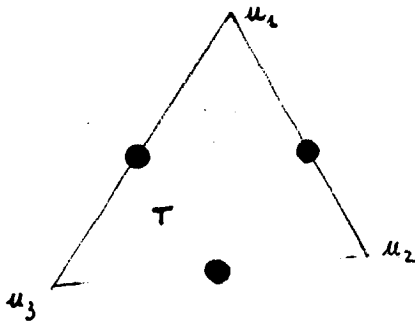
$$\int_{\tau} f(u) dx \approx \text{aire}(\tau) \cdot f\left(\frac{u_1 + u_2 + u_3}{3}\right)$$

d) formule à 3 points ($O(h^2)$) \sim mass-lumping



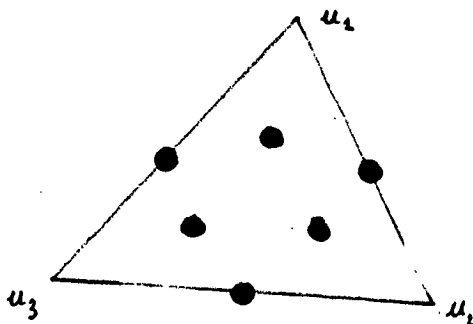
$$\int_{\tau} f(u) dx \approx \frac{\text{aire}(\tau)}{3} \left[f(u_1) + f(u_2) + f(u_3) \right]$$

e) formule à 3 points, exacte pour polynômes 2^{ème} degré ($O(h^3)$)
(déjà donnée en a))



$$\int_{\tau} f(u) dx \approx \frac{\text{aire}(\tau)}{3} \left[f\left(\frac{u_1 + u_2}{2}\right) + f\left(\frac{u_2 + u_3}{2}\right) + f\left(\frac{u_1 + u_3}{2}\right) \right]$$

f) formule à 6 points (degré 3) ($O(h^4)$)

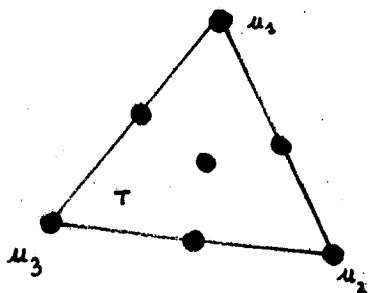


$$\begin{aligned} \int_{\tau} f(u) dx \approx & \frac{\text{aire}(\tau)}{30} \left[f\left(\frac{u_1 + u_2}{2}\right) + f\left(\frac{u_1 + u_3}{2}\right) + f\left(\frac{u_2 + u_3}{2}\right) \right] \\ & + \frac{9 \text{aire}(\tau)}{30} \left[f\left(\frac{4u_1 + u_2 + u_3}{6}\right) + f\left(\frac{u_1 + 4u_2 + u_3}{6}\right) \right. \\ & \left. + f\left(\frac{u_1 + u_2 + 4u_3}{6}\right) \right] \end{aligned}$$

g) formule à 7 points

(degré 3)

$O(h^4)$

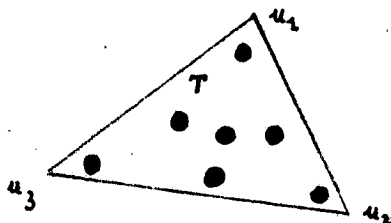


$$\int_T f(u) dx \approx \frac{\text{aire}(T)}{60} \left[3 \left(f(u_1) + f(u_2) + f(u_3) \right) + 8 \left(f\left(\frac{u_1+u_2}{2}\right) + f\left(\frac{u_2+u_3}{2}\right) + f\left(\frac{u_3+u_1}{2}\right) \right) + 27 f\left(\frac{u_1+u_2+u_3}{3}\right) \right]$$

h) formule à 7 points

(degré 5)

$O(h^6)$



On évalue l'intégrale par :

$$\begin{aligned} \int_T f(u) dx &\approx \frac{9 \text{ aire}(T)}{40} \cdot f\left(\frac{u_1+u_2+u_3}{3}\right) \\ &+ B \cdot \text{aire}(T) \cdot \left[f(\alpha_1 u_1 + \beta_1 u_2 + \beta_1 u_3) + f(\beta_1 u_1 + \alpha_1 u_2 + \beta_1 u_3) \right. \\ &\quad \left. + f(\beta_1 u_1 + \beta_1 u_2 + \alpha_1 u_3) \right] \\ &+ C \cdot \text{aire}(T) \cdot \left[f(\alpha_2 u_1 + \beta_2 u_2 + \beta_2 u_3) + f(\beta_2 u_1 + \alpha_2 u_2 + \beta_2 u_3) \right. \\ &\quad \left. + f(\beta_2 u_1 + \beta_2 u_2 + \alpha_2 u_3) \right] \end{aligned}$$

$$B = \frac{155 + \sqrt{15}}{1200} \sim 0.1323941527$$

$$\alpha_1 = \frac{9 - 2\sqrt{15}}{24} \sim 0.0597158717$$

$$\beta_1 = \frac{6 + \sqrt{15}}{24} \sim 0.4701420641$$

$$C = \frac{155 - \sqrt{15}}{1200} \sim 0.1259391805$$

$$\alpha_2 = \frac{9 + 2\sqrt{15}}{24} \sim 0.7974269853$$

$$\beta_2 = \frac{6 - \sqrt{15}}{24} \sim 0.1012865073$$

Une fois choisi le schéma en temps et les formules d'intégrations numériques sur chaque élément, on obtient à chaque étape de temps un problème non linéaire dans \mathbb{R}^P à résoudre.

Comme nous l'avons déjà indiqué nous omettrons l'indice h référençant au problème discrétisé pour ne pas alourdir les notations.

Nous nous sommes intéressé au schéma implicite et au schéma de GEAR (à deux pas) ainsi, dans (2.8)

$$(2.12) \left\{ \begin{array}{l} \mu = \tau_n \\ f = C^{n-1} \end{array} \right.$$

pour le schéma IMPLICITE, et

$$(2.13) \left\{ \begin{array}{l} \mu = \frac{\tau_n \cdot (\tau_{n-1} + \tau_n)}{2\tau_n + \tau_{n-1}} \\ f = \frac{(\tau_{n-1} + \tau_n)^2}{(2\tau_n + \tau_{n-1})} C^{n-1} - \frac{\tau_n^2}{\tau_{n-1} (2\tau_n + \tau_{n-1})} C^{n-2} \end{array} \right.$$

pour le schéma de GEAR (à pas variable)

En ce qui concerne les formules d'intégration numérique du coefficient de diffusion, nous avons testé la formule à 1 point c), la formule à 3 points d), la formule à 3 points e) et la formule à 7 points g).

3 Algorithmes de résolution

3.1 Algorithme 1 - Linéarisation

Nous allons indiquer maintenant un algorithme, qu'est le premier auquel on peut penser lorsque l'on a ce type de problème à résoudre. On va en quelque sorte simplifier le problème que l'on a effectivement à résoudre, en se ramenant à un problème que l'on sait traiter ; un problème linéaire.

On suppose donc que l'on connaît la solution (concentration de l'impureté diffusante C) au temps $n-1$, on cherche la solution C^n au temps n , en résolvant le système linéaire

$$(3.1) \left\{ \begin{array}{l} \int_{\Omega} C^n \cdot \varphi \, dx + \mu \int_{\Omega} D(C^{n-1}) \nabla C^n \cdot \nabla \varphi \, dx = \int_{\Omega} f \cdot \varphi \, dx \quad \forall \varphi \in \mathcal{V}_0 \\ C^n \in \mathcal{V} \end{array} \right.$$

En calculant le coefficient de diffusion $D(C)$ à l'étape de temps précédente, on simplifie évidemment le problème à traiter mais un tel schéma ne donnera pas toujours des résultats corrects. Les résultats numériques ne seront acceptables que si le pas de temps est suffisamment petit et/ou si le coefficient de diffusion varie très peu avec la concentration (dans le cas de faibles concentrations d'impuretés) ; cela est effectivement constaté dans les applications pratiques.

3.2 - Algorithme 2 - Point fixe

Pour assurer la convergence de la méthode de linéarisation précédente, nous pensons qu'il est nécessaire de faire des itérations du type de (3.1), à l'intérieur du pas de temps lui même surtout lorsque le coefficient de diffusion dépend plus fortement de la solution.

Partant de $C^{n,0}$ C^{n-1} , on construit la suite de problèmes linéaires ($k = 0, 1, 2, \dots$)

$$(3.2) \left\{ \begin{array}{l} \int_{\Omega} C^{n,k+1} \varphi \, dx + \mu \int_{\Omega} D(C^{n,k}) \nabla C^{n,k+1} \cdot \nabla \varphi \, dx = \int_{\Omega} f \varphi \, dx \quad \forall \varphi \in \mathcal{V}_0 \\ C^{n,k+1} \in \mathcal{V} \end{array} \right.$$

Lorsque la suite en k a convergé (ou bien après un nombre d'étapes fixées à l'avancé ($k \leq k_0$)), on pose $C^n = C^{n,k+1}$ et l'on change de pas de temps. Un tel type d'algorithme dit de point fixe est souvent utilisé pour des problèmes de diffusion non linéaires.

Pour simuler numériquement le problème de diffusion, on définit 2 suites imbriquées de problèmes linéaires dont la matrice change à chaque fois. Si on utilise une méthode directe de résolution de systèmes linéaires, la factorisation de la matrice (qui est l'opération la plus coûteuse) doit être faite à chaque fois et cela peut devenir prohibitif du point de vue temps calcul.

En général pour les problèmes de diffusion (pb paraboliques) approchés de l'une des façons précédentes, il est intéressant d'utiliser des méthodes itératives pour résoudre les systèmes linéaires : en effet, une bonne approximation initiale du processus itératif consiste à prendre la solution connue à l'étape précédente ; de plus les processus itératifs de résolution de systèmes linéaires (de type surrelaxation ponctuelle) se généralisent assez facilement au cas non linéaire.

Ainsi, si l'on utilise une méthode itérative de type surrelaxation ponctuelle pour résoudre chaque problème linéaire (3.2) on peut aboutir à la variante suivante.

3.3 - Algorithme 3 - Variante itérative de linéarisation

En résolvant (3.2) par une méthode itérative, on confond l'indice k avec l'indice de la méthode itérative, autrement dit, lors de la résolution du système linéaire, on n'effectue qu'un seul "balayage" (qu'une seule itération) de la méthode de relaxation ponctuelle et puis on change les coefficients de la matrice en recalculant les $D(C^{n,k})$. Un tel processus s'est avéré extrêmement efficace du point de vue temps calcul et encombrement mémoire.

Il n'était pas évident à priori qu'un processus aussi simple puisse être appliqué à la résolution de problèmes non linéaires elliptiques de ce type. Nous

avons l'expérience à l'INRIA de problèmes non linéaires dans lequel le "coefficient de diffusion D " ne dépendait pas de C mais de $|\nabla C|$ (une telle dépendance se rencontre par exemple en magnétostatique ou en écoulements subsoniques compressibles), et pour ces problèmes, le type d'algorithme précédent "trop explicite" conduisait souvent à une convergence difficile du processus itératif (oscillations). Pour cela nous avons développé des algorithmes de type relaxation non linéaire et de Newton Raphson (avec variantes) et c'est ce genre d'algorithme que nous avons d'abord adaptés et appliqués au problème de diffusion d'impuretés.

3.4 - Algorithmes 4 - Relaxation non linéaire

Différents algorithmes de relaxation non linéaire avaient été étudiés en particulier pour le problème de magnétostatique, mais nous n'avons retenu ici que celui qui s'était montré le plus efficace, à savoir E.G.S.N. (extrapolated-Gauss-Seidel-Newton).

Le problème non linéaire que nous traitons est le suivant :

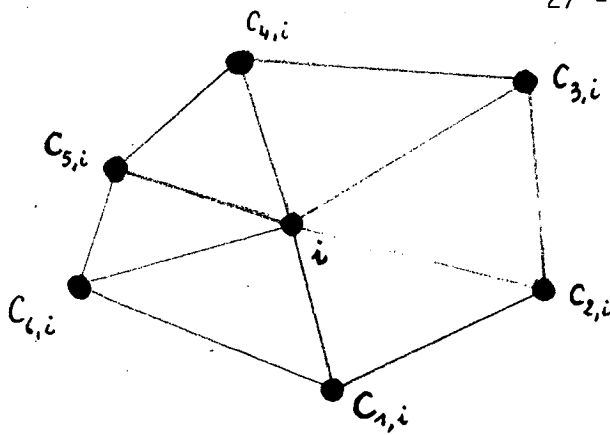
$$(3.3) \left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } C^n \in \mathcal{V}, \text{ solution de} \\ \int_{\Omega} C^n \cdot \varphi \, dx + \mu \int_{\Omega} D(C^n) \nabla C^n \cdot \nabla \varphi \, dx = \int_{\Omega} f \cdot \varphi \, dx \quad \forall \varphi \in \mathcal{V}_0 \end{array} \right.$$

Dans la formulation (3.3) qu'est en quelque sorte la "vraie formulation" on tient compte implicitement de la non linéarité du coefficient de diffusion et cela conduit donc à un problème non linéaire dans \mathbb{R}^p (si p est le nombre d'inconnues du problème), que l'on pourra aussi expliciter sous la forme du système suivant :

$$(3.4) \left\{ \begin{array}{l} F_1 (C_1^n, C_2^n, C_3^n, \dots, C_p^n) = 0 \\ F_2 (C_1^n, C_2^n, C_3^n, \dots, C_p^n) = 0 \\ \vdots \\ F_p (C_1^n, C_2^n, C_3^n, \dots, C_p^n) = 0 \end{array} \right.$$

Les C_i étant les inconnues du problème, représentant la valeur de la concentration d'impuretés aux sommets des triangles (noeuds de la triangulation). Les fonctions F_i découlent de (3.3) lorsqu'on prend successivement pour φ , les différentes fonctions de base w_i de \mathcal{V}_0 .

Evidemment comme dans le "cas linéaire", toutes les inconnues ne sont pas présentes dans chaque équation, il est facile de voir, vu l'approximation par éléments finis retenue, que seuls les C_{ki} voisins de C_i interviennent pour l'équation n°i.



L'algorithme E.G.S.N. s'explique sur (3.4) par

$$(3.5) \left\{ \begin{array}{l} C^{n,0} \text{ donné, on calcule successivement chaque composante de } C^{n,l+1} \text{ par} \\ C_i^{n,l+1} = C_i^{n,l} - \omega \frac{F_i(C_1^{n,l+1}, C_2^{n,l+1}, \dots, C_{i-1}^{n,l+1}, C_i^{n,l}, \dots, C_p^{n,l})}{\frac{\partial F_i}{\partial C_i}(C_1^{n,l+1}, C_2^{n,l+1}, \dots, C_{i-1}^{n,l+1}, C_i^{n,l}, \dots, C_p^{n,l})} \\ i = 1, 2, 3, \dots, p \\ \omega : \text{paramètre de relaxation} \quad (0 < \omega < 2) \end{array} \right.$$

$l = 0, 1, 2, \dots$ est l'index d'itération de la méthode E.G.S.N.

Evidement pour un problème de type parabolique, il est tout à fait indiqué de choisir $C^{n,0} \equiv C^{n-1}$.

Un critère d'arrêt des itérations en l , facile à intégrer à l'algorithme et qui s'est révélé satisfaisant est le suivant :

$$(3.6) \quad \frac{\sum_i |C_i^{n,l+1} - C_i^{n,l}|}{\sum_i |C_i^{n,l+1}|} \leq \epsilon = 10^{-5}$$

Par rapport à l'algorithme 3, qui ne nécessite que le calcul de la fonction $D(C)$, l'algorithme E.G.S.N. nécessite en plus l'évaluation de la dérivée $D'(C)$. (Voir l'annexe 2 pour le calcul de la dérivée).

Cet algorithme a donné de bons résultats et converge sans oscillations même pour de très fortes concentrations d'impuretés ; la mise en oeuvre de E.G.S.N., nécessite qu'un minimum de place mémoire, et bien qu'il soit plus coûteux que l'algorithme 3, il est sûrement plus robuste.

3.5 - Algorithme 5 - Newton-Raphson

Si pour résoudre (3.3), on applique la méthode de Newton-Raphson, on obtient une suite de problèmes linéaires (index k), qui sous forme variationnelle s'expriment par :

On pose $C^{n,0} = C^{n-1}$ et on cherche $C^{n,k+1}$ dans \mathcal{V} solution de

$$(3.7) \quad \begin{cases} \int_{\Omega} C^{n,k+1} \cdot \varphi \, dx + \mu \int_{\Omega} D(C^{n,k}) \nabla C^{n,k+1} \cdot \nabla \varphi \, dx + \mu \int_{\Omega} D'(C^{n,k}) C^{n,k} \nabla C^{n,k} \cdot \nabla \varphi \, dx \\ = \int_{\Omega} f \cdot \varphi \, dx + \mu \int_{\Omega} D'(C^{n,k}) C^{n,k} \nabla C^{n,k} \cdot \nabla \varphi \, dx \quad \forall \varphi \in \mathcal{V}_0 \end{cases}$$

$k = 0, 1, 2, \dots$, D' désigne la dérivée du coefficient de diffusion par rapport à C . A la convergence de cette suite en k , on obtient C^n , et on progresse ainsi de suite dans le temps. Il faut noter que la matrice du système linéaire (3.7) change à chaque étape k (comme pour la formulation (3.2)) et si l'on veut utiliser une méthode directe de résolution de systèmes linéaires (cholesky par exemple puisque la matrice est symétrique et définie positive), la factorisation qu'est l'étape coûteuse en temps calcul doit être refaite à chaque pas.

Pour un problème de diffusion non linéaire type, il a fallu en moyenne 6 iterations de Newton pour chaque pas de temps (celui-ci valait $\tau = 2,5mn$) pour atteindre la convergence. Cette méthode qui comme EGNS nécessite le calcul de la dérivée du coefficient de diffusion, demande plus de place mémoire et est autant, sinon plus, coûteuse en temps calcul.

3.6 - Algorithme 6 - Variante itérative de Newton-Raphson

Si on utilise, comme dans l'algorithme 3, une méthode itérative du type relaxation ponctuelle, et que l'on fait jouer à k dans (3.7), le rôle de l'indice de balayage, on obtient ce que nous appellerons une variante itérative de la méthode de Newton-Raphson qui converge nettement plus vite que cette dernière (on veut dire par là, qu'elle demande moins de temps calcul pour atteindre la convergence).

Cet algorithme a de nombreux points communs avec l'algorithme E.G.S.N. et semble être plus rapide que ce dernier. Le nombre de cycles pour atteindre la convergence est à peu près toujours le même, mais il y a moins de calculs de fonctions $D(C)$ dans la variante de Newton-Raphson que dans E.G.S.N.

3.7 - Une autre formulation du problème de diffusion non linéaire

Si on note χ la fonction de la concentration C , définie par

$$(3.8) \quad \chi(C) = \int_0^C D(v) \, dv$$

alors (2.7) (ou (2.8)) devient

$$(3.9) \left\{ \begin{array}{l} \text{trouver } C \in \mathcal{V}, \text{ tel que} \\ \int_{\Omega} C \cdot \varphi \, dx + \mu \int_{\Omega} \nabla(\gamma(C)) \cdot \nabla \varphi \, dx = \int_{\Omega} f \cdot \varphi \, dx \quad \forall \varphi \in \mathcal{V}_0 \end{array} \right.$$

Des calculs analytiques nous ont permis d'obtenir explicitement la fonction (voir annexe 1) ; et nous utilisons évidemment cette expression pour la simulation numérique. De toutes façons, il subsiste toujours un problème d'intégration numérique sur un élément triangulaire pour le terme faisant intervenir $\gamma(C)$.

Pour la mise en oeuvre pratique, nous avons procédé de la façon suivante (nous omettrons les indices h pour le problème discrétisé, de façon à ne pas alourdir les notations) :

Soit $(\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_N)$ la base usuelle de \mathcal{V} (espace discret) dont les p ($p \leq N$) premiers éléments appartiennent à \mathcal{V}_0 . Dans ce qui suit on identifie les fonctions $v \in \mathcal{V}$ avec les N uples $(v^1, v^2, v^3, \dots, v^N)$ ou $v^j = v(x_j)$, x_j étant le sommet associé à la fonction de base φ_j .

La fonction γ , si nous conservons l'approximation linéaire pour les concentrations devrait s'exprimer par

$$(3.10) \quad \gamma(C) = \gamma \left(\sum_{i=1}^N C^i \varphi_i \right)$$

nous remplaçons cette expression par

$$(3.11) \quad \tilde{\gamma}(C) = \sum_{i=1}^N \gamma(C^i) \varphi_i$$

ce qui revient à dire que l'on prend une approximation de $\gamma(C)$ qui varie linéairement sur chaque triangle.

De cette façon, la mise en oeuvre d'un algorithme du type E.G.S.N. est immédiate, et évidemment la dérivée de $\tilde{\gamma}(C)$ qui intervient dans l'algorithme est donnée par $D(C)$.

La réalisation pratique de E.G.S.N. sur cette formulation est apparue plus coûteuse que sur la formulation initiale (les évaluations de fonctions sont plus nombreuses et coûteuses).

Cet algorithme aura pour numéro 7 et sera aussi référencé comme E.G.S.N. sur formulation intégrale ; il peut s'expliquer ainsi :

$C^{n,0}$ donné, on calcule successivement chaque composante de $C^{n,l+1}$ par :

$$(3.12) \quad C_i^{n,l+1} = C_i^{n,l} - \omega \frac{\int_{\Omega} \bar{C}^{n,l} \varphi_i \, dx + \mu \int_{\Omega} \nabla(\gamma(\bar{C}^{n,l})) \cdot \nabla \varphi_i \, dx - \int_{\Omega} f \varphi_i \, dx}{\int_{\Omega} |\varphi_i|^2 \, dx + \mu D(C_i^{n,l}) \int_{\Omega} |\nabla \varphi_i|^2 \, dx}$$

$i = 1, 2, \dots, p$

ω : paramètre de relaxation choisi dans $]0, 2[$

φ_i est la fonction de base associé au noeud i

Evidemment, les sommes sur Ω (domaine entier) dans (3.12) se réduisent à une somme d'intégrales sur les triangles ayant le noeud i pour sommet. De même $\bar{C}^{n,1}$ est identifié au vecteur dont les composantes d'indice $\leq i$ sont à l'état $(1+1)$ et dont les composantes d'indice $\geq i$ sont à l'état 1. Pour le calcul de $\int |\varphi_i|^2 dx$ on utilise soit le calcul exact, soit le mass-lumping comme indiqué précédemment.

On peut de même définir des méthodes de Newton sur cette formulation.

3.8 - Algorithme 8 - Newton-Raphson sur formulation intégrale

Rappelons que l'on veut résoudre le problème non linéaire

$$(3.13) \begin{cases} \int_{\Omega} C^n \cdot \varphi dx + \mu \int_{\Omega} \nabla \gamma(C^n) \cdot \nabla \varphi dx = \int_{\Omega} f \cdot \varphi dx & \forall \varphi \in \mathcal{V}_0 \\ C^n \in \mathcal{V} \end{cases}$$

Si on applique la méthode de Newton-Raphson sur la formulation discrète et avec l'approximation (3.11) pour γ , on obtiendra la suite de problèmes linéaires suivants :

On prendra $C^{n,0} \equiv C^{n-1}$

et puis pour $k \geq 0$ et $C^{n,k} \in \mathcal{V}$ donnés, on déterminera $C^{n,k+1} \in \mathcal{V}$ solution du problème linéaire :

$$(3.14) \begin{cases} \int_{\Omega} (C^{n,k+1} - C^{n,k}) \cdot \varphi_j dx + \mu \sum_{i=1}^N \gamma'(C_i^{n,k}) (C_i^{n,k+1} - C_i^{n,k}) \int_{\Omega} \nabla \varphi_i \cdot \nabla \varphi_j dx \\ = \int_{\Omega} f \cdot \varphi_j dx - \int_{\Omega} C^{n,k} \cdot \varphi_j dx - \mu \sum_{i=1}^N \gamma(C_i^{n,k}) \int_{\Omega} \nabla \varphi_i \cdot \nabla \varphi_j dx \end{cases}$$

$j = 1, 2, \dots, p$

C'est à dire,

$$(3.15) \int_{\Omega} C^{n,k+1} \cdot \varphi_j dx + \mu \sum_{i=1}^N D(C_i^{n,k}) C_i^{n,k+1} \int_{\Omega} \nabla \varphi_i \cdot \nabla \varphi_j dx = g_j^{n,k}$$

$j = 1, 2, \dots, p$

avec le second membre $g_j^{n,k}$ donné par

$$(3.16) g_j^{n,k} = \int_{\Omega} f \cdot \varphi_j dx + \mu \sum_{i=1}^N [D(C_i^{n,k}) C_i^{n,k} - \gamma(C_i^{n,k})] \int_{\Omega} \nabla \varphi_i \cdot \nabla \varphi_j dx$$

Bien entendu, si on utilise comme dans les formulations antérieures, une méthode de type relaxation ponctuelle pour résoudre le système linéaire (3.15), on obtiendra encore une variante en confondant l'index k de la méthode de Newton avec l'index de la méthode itérative.

Cette variante, assez efficace sera notée Algorithme 9 :

Newton itératif sur formulation intégrale.

3.9 Remarques

Etant donné que les concentrations sont des fonctions positives, que les technologues, bien souvent représentent les résultats sous forme de logarithmes de la concentration, il apparaissait que le changement de fonction inconnue suivant était justifié

$$(3.17) \quad C = e^v$$

conduisant à des problèmes du type suivant (c'est une formulation possible)

$$(3.18) \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{trouver } v \in V_1 \text{ tel que} \\ \int_{\Omega} v \cdot \varphi \, dx + \mu \int_{\Omega} D(e^v) \nabla v \cdot \nabla \varphi \, dx - \mu \int_{\Omega} D(e^v) |\nabla v|^2 \varphi \, dx = \int_{\Omega} f \cdot \varphi \, dx \\ \forall \varphi \in V_0 \end{array} \right.$$

Ce type de problème semble plus délicat à étudier numériquement et étant donné que les formulations précédentes ont donné des résultats satisfaisant les technologues dans la pratique les recherches ne se sont pas poursuivies sur la formulation (3.18).

4 - Expériences et résultats numériques

4.1 - Présentation des problèmes traités

Trois problèmes-tests ont été traités

- A. Diffusion d'arsenic par prédépot à 1000 degrés durant 20 minutes
- B. Redistribution d'Arsenic après implantation ionique (dose 10^{14} , énergie 80Kev), à 1000 degrés durant 20 minutes.
- C. Diffusion de Bore prédéposé à 1100 degrés durant 20 minutes.

La concentration initiale en l'autre impureté est supposée uniforme et égale à 10^{15} atomes/cm³ (valeur normalisée $1.76 \cdot 10^{-4}$). Lors des prédépôts la concentration à la surface varie de 10^{16} à 10^{21} atomes/cm³.

On a représenté sur la figure 35, le domaine de simulation. C'est un simple rectangle (pour les problèmes tests envisagés), et la présence de l'oxyde n'interviendra dans les équations que par la condition aux limites imposés à l'interface $S_i-S_iO_2$ (élément de frontière du domaine S_i , repérée par ②). Dans ces simulations, l'oxyde est supposé être un masque parfait pour la diffusion, c'est à dire qu'il empêche les impuretés de sortir du silicium. Le flux est donc nul sur cette partie ②. De même pour raison de symétrie, cette condition de flux nul est aussi valable pour les parties ③ et ⑤. Sur la partie ④ de la frontière (fond du caisson), on peut en fait soit prendre une condition de flux nul, soit imposer une concentration nulle ; en principe les impuretés restent au voisinage du bord supérieur (zone intéressante).

La condition aux limites qu'il faut imposer sur la partie ①, dépendra du problème traité

- Conditions de flux nul dans le cas de redistribution
- Condition de Dirichlet non homogène dans le cas de prédéposition (valeur de la concentration au bord)

Un résultat de simulation intéressant sera bien entendu la répartition de la concentration des impuretés (et nous donneront différentes représentations de ce résultat) mais aussi la représentation de la jonction (ligne où la concentration d'impuretés de type négatif égale la concentration en impureté de type positif), qui dans nos problèmes tests sera représentée par une équipotentielle particulière. Sur certaines parties du domaine, les résultats des simulations numériques pouvaient être comparés à des résultats de simulation unidimensionnelle (numérique ou analytique).

4.2 - Maillage du domaine

Le domaine qu'il faut mailler ne présente aucune difficulté, (domaine rectangulaire). Cependant, en vue de réduire l'erreur d'approximation compte tenu du fait que les choses intéressantes vont se passer au voisinage du bord supérieur, il est préférable d'avoir une triangulation plus fine dans cette région. Nous avons donc spécialement développé un logiciel de maillage permettant de prendre facilement en compte cette contrainte.

On a représenté sur la figure 36 le maillage triangulaire retenu pour les simulations numériques. Il comporte 1271 noeuds et 2400 triangles.

Nous avons développé parallèlement un algorithme de régularisation d'un maillage (sur un domaine convexe) et l'on montre sur la figure 37, le résultat obtenu lorsque l'on applique au maillage de la figure 36.

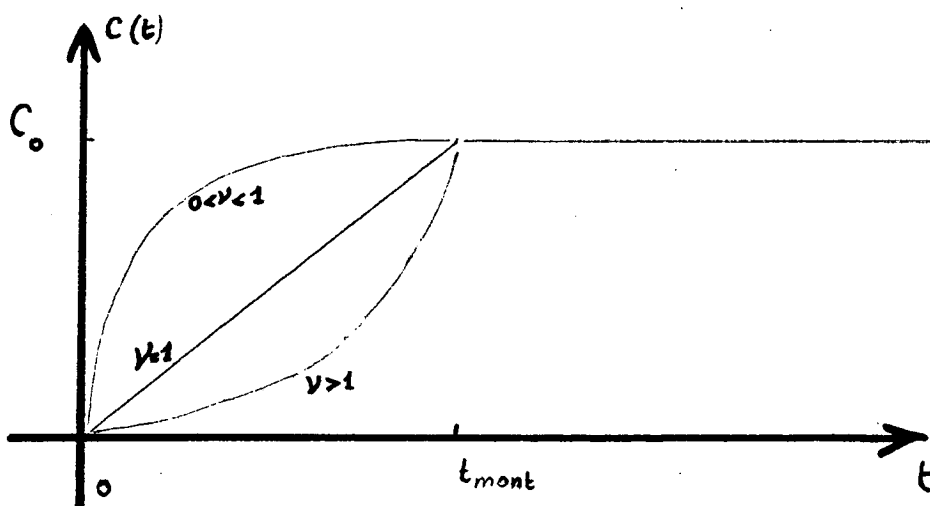
4.3 - Traitement de la condition au bord dans le cas du prédépôt

L'étape technologique de prédépôt se présente comme suit : un gaz contenant les impuretés circule au dessus de la tranche de silicium. Les impuretés pénètrent dans le S_i sur quelques centaines d'Angströms. La concentration en surface atteint la "solubilité limite" de l'impureté dans le silicium (cette solubilité limite est fonction de la température T).

Pendant le prédépôt la concentration en surface n'atteint pas spontanément la solubilité limite mais croît de façon monotone vers cette limite. D'où l'idée de prévoir dans le logiciel de simulation, une condition aux limites sur (1) (figure 35), qui dépend du temps. On peut faire évoluer la concentration au bord, depuis la valeur 0 jusque la valeur limite C_0 .

Si t_{mont} est le temps de "montée" pour atteindre la valeur C_0 , la condition au bord est donnée par la relation (γ coefficient à choisir)

$$(4.1) \quad C(t) = \min \left[C_0, C_0 \cdot \left(\frac{t}{t_{mont}} \right)^\gamma \right]$$



Disons tout de suite que si le process dure suffisamment longtemps par rapport à t_{mont} , les résultats obtenus à la fin du process sont les mêmes.

Cette condition de concentration évolutive au bord avait été introduite pour être plus près de la réalité physique d'une part, mais aussi pour éviter d'avoir à prendre en compte des discontinuités trop fortes de concentrations. (On suppose en effet au départ que la concentration de l'impureté diffusante est nulle à l'intérieur du silicium).

En fait, même du point de vue numérique, cela ne posait aucun problème de partir directement avec la condition C_0 au bord.

4.4 - Choix du pas de temps et du paramètre de relaxation w

Au début de nos expériences numériques nous avons adopté la stratégie suivante pour le choix des pas de temps :

On part d'un pas de temps très petit, à chaque étape on multiplie le pas de temps par un certain facteur jusqu'à atteindre un pas de temps maximum que l'on s'est fixé à l'avance, on poursuit alors le processus avec un pas de temps constant jusqu'à la fin de la simulation.

Le choix de cette stratégie provient en autres du problème de discontinuité initiale dans le cas du prédépôt. Ainsi nous avons choisi

$$(4.2) \quad \tau_{in} = \frac{0.3333}{4095} = 0.814 \cdot 10^{-4} \text{ heures } (\sim 0.293 \text{ s})$$

Le pas de temps était ensuite choisi selon la formule de récurrence

$$(4.3) \quad \tau_{n+1} = \min (\tau_{max}, \tau_n \cdot \alpha)$$

où nous avons pris $\alpha = 2$.

Différentes valeurs de τ_{max} ont aussi été envisagées. (Valeurs correspondant à 0.312 mn , 0.625 mn , 1.25 mn , 2.5 mn , 5 mn).

D'autre part, étant donné (comme nous l'avons vu précédemment) que les méthodes de type itératif (surrelaxation ponctuelle) se prêtaient bien au traitement numérique de problèmes de diffusion, restait à choisir le paramètre w (aussi optimal que possible).

On sait que lorsque le pas de temps est "très petit" (notion relative) ; l'opérateur linéaire ou non linéaire de diffusion est proche de l'Identité et donc le paramètre de relaxation optimal est proche de 1. Au fur et à mesure que le pas de temps augmente la contribution de la partie diffusion proprement dire augmente et le paramètre w doit augmenter aussi.

Ainsi à chaque fois que le pas de temps était modifié par la formule (4.3), on faisait de même

$$(4.4) \quad w_{n+1} = \min (w_{max}, w_n \cdot \beta)$$

avec de toute façons $w_{max} < 2$.

Différentes valeurs de β ont été considérées entre 1 et 1.04 et la valeur = 1.025 a donné des résultats acceptables dans tous les cas simulés.

Fort de cette expérience on a voulu ensuite déterminer les pas de temps successifs en contrôlant l'erreur à chaque pas de discrétisation en temps (cela revient à évaluer une dérivée seconde en temps pour le schéma implicite et une dérivée troisième pour le schéma de GEAR utilisé) ; parallèlement à cela, et compte tenu des résultats précédents, il fallait trouver une expression analytique donnant le paramètre ω en fonction du pas de temps τ , mais tenant compte aussi du coefficient de diffusion et du maillage. Une telle technique a été intégrée dans le logiciel de simulation TITAN, utilisé au CNET-CNS.

4.5 - Résultats numériques

a - Remarques sur l'intégration numérique (§2)

Le problème test est le suivant : Prédépôt d'Arsenic, durant 20 mn à 1000 °C. La concentration au bord (①) est prise à 176. ($\sim 10^{21}$). On tient compte du clustering. Les paramètres importants pour le technologue sont d'une part la profondeur de jonction et d'autre part la diffusion latérale. (Le substrat est uniformément dopé en bore : $1.76 \cdot 10^{-4}$ en normalisé ($\sim 10^{15}$)).

Le schéma en temps utilisé est le schéma de GEAR avec un pas de temps maximum de 0.625 mn. (Ce qui conduit à 38 pas de temps).

Intégration numérique	Profondeur de JONCTION	Diffusion latérale	CPU
1 point	0.17729	0.1428	x
3 points	0.17902	0.1506	2. x
7 points	0.17840	0.1475	3.8 x

Pour d'autres tests les résultats ont été comparables ; ils prouvent que l'intégration numérique la plus simple (1 point) est suffisante (de plus temps de calcul minimum). Cela peut s'expliquer aussi par le fait que la densité de triangles dans la zone intéressante est suffisamment grande.

Il est pratiquement sûr que les résultats seraient en faveur de l'intégration plus précise si le maillage était plus grossier.

b - Remarques relatives aux algorithmes

Le problème traité ici est le suivant : Prédépôt d'Arsenic durant 20 mn à 1000°C. La concentration au bord (1) est prise à 17.6 en normalisé (ce qui correspond à une concentration réelle de 10^{20} At/cm³). Pour ce jeu d'essai on n'a pas tenu compte du CLUSTERING. Le substrat est uniformément dopé en bore à une valeur de $1.76 \cdot 10^{-4}$ (c'est à dire 10^{15} At/cm³). Nous allons voir comment se comportent les différents algorithmes exposés au §3.

ALGORITHME 1 . Linearisation

τ_{max}	Schema GEAR				Schema IMPLICITE		
	Prop. Jonction	Diff. laterale	CPU		Prop. jonction	Diff. laterale	CPU
5 mn	0.11973	0.10216	347		0.15167	0.13148	366
2.5 mn	0.13154	0.10771	449		0.15410	0.12671	441
1.25 mn	0.13993	0.11587	615		0.15438	0.12704	521
0.625 mn	0.13846	0.12056	919		0.15486	0.12719	978
0.3125 mn	0.15069	0.12281	1506		0.15520	0.12683	1539

ALGORITHME 3 - Variante iterative de linearisation

τ_{max}	Schema GEAR				Schema IMPLICITE		
	Prop. Jonction	D. FC. laterale	CPU		Prop. Jonction	D. FC. laterale	CPU
5 mn	0.15138	0.12226	408		0.18013	0.15125	490
2.5 mn	0.15155	0.12219	512		0.17417	0.14010	569
1.25 mn	0.15274	0.12316	675		0.16573	0.13403	748
0.625 mn	0.15399	0.12552	912		0.15924	0.12981	1032
0.3125 mn	0.15480	0.12624	1312		0.15124	0.12663	1428

ALGORITHME 4 Relaxation non linéaire (EGSN)

Schema GEAR				Schema IMPLICITE		
T_{max}	Prof. Jonction	Diff. laterale	CPU	Prof. Jonction	Diff. laterale	CPU
5mn				0.18024	0.15126	1180
2.5mn				0.17421	0.14010	1381
1.25mn				0.16575	0.13403	1801
0.625mn				0.15930	0.12981	2387
0.3125mn				0.15135	0.12663	3217

ALGORITHME 6 Variante itérative de NEWTON-RAPHSON

Schema GEAR				Schema IMPLICITE		
T_{max}	Prof. Jonction	Diff. laterale	CPU	Prof. Jonction	Diffusion laterale	CPU
5mn	0.15140	0.12226	689			
2.5mn	0.15157	0.12229	874			
1.25mn	0.15276	0.12376	1147	0.16575	0.13403	1250
0.625mn	0.15400	0.12552	1525			
0.3125mn	0.15481	0.12624	2147			

On voit d'après les résultats que comme prédit (§ 3), l'algorithme 1 (linéarisation) ne donne des résultats acceptables que si le pas de temps est suffisamment petit. Les algorithmes 2 à 9 (tous les résultats ne sont pas reportés ici) donnent pratiquement les mêmes résultats, dans des conditions semblables, seuls les temps C.P.U varient d'un algorithme à l'autre. On peut constater que l'algorithme 3, très simple à mettre en oeuvre donne les meilleurs résultats du point de vue temps calcul.

D'autre part au vu des résultats précédents, il apparaît que les grandeurs intéressantes du point de vue technologique (la profondeur de jonction et la diffusion latérale) semblent moins dépendre du pas de temps dans le cas du schéma de GEAR que dans le cas du schéma IMPLICITE

(Le schéma de GEAR est plus précis en temps).

On peut voir sur la figure 38 comment varie la profondeur de jonction en fonction du pas de temps (pour les schémas de GEAR et IMPLICITE).

Signalons enfin que le comportement des algorithmes est semblable dans le cas où l'on prend en compte le clustering (la jonction est moins profonde dans ce cas).

c. Influence du choix de β dans 4.4

Nous allons donner maintenant des indications relatives au coefficient β dans la formule (4.4). Nous nous remettons dans les conditions précédentes (†). Le pas de temps sera choisi à 1.25 mn. Ce qui est intéressant de mesurer, c'est le nombre de cycles de la méthode itérative utilisée (EGSN, Newton itératif, linéarisation itérative) et aussi la valeur moyenne par pas de temps (on effectue 23 pas de temps pour atteindre le temps final : 20 mn).

Nous présentons des cas avec et sans clustering

ALGORITHME 6. Variante itérative Newton-Raphson. (SANS CLUSTERING), $\tau = 1,25 \text{ mn}$					
β	BALAYAGES		Prof. jonction	Diff. latérale	CPU
	TOTAL	MOYENNE			
1.01	258	11.22	0.16 575	0.13 403	1475
1.02	228	9.91	0.16 575	0.13 403	1298
1.025	220	9.57	0.16 575	0.13 403	1250
1.03	221	9.61	0.16 575	0.13 403	1256
1.04	246	10.7	0.16 574	0.13 403	1377

ALGORITHME 6. Variante itérative Newton-Raphson (CLUSTERING), $\tau = 1,25 \text{ mn}$					
β	BALAYAGES		Prof. jonction	Diff. latérale	CPU
	TOTAL	MOYENNE			
1.01	181	7.87	0.13 957	0.11 462	1440
1.02	169	7.35	0.13 957	0.11 462	1337
1.025	173	7.52	0.13 957	0.11 463	1370
1.03	185	8.04	0.13 957	0.11 463	1463
1.04	223	9.70	0.13 956	0.11 464	1751

ALGORITHME 4. Relaxation non linéaire EGSN (CLUSTERING), $\tau = 1,25 \text{ mn}$					
β	BALAYAGES		Prof. jonction	Diff. latérale	CPU
	TOTAL	MOYENNE			
1.01	190	8.26	0.13 957	0.11 462	2708
1.02	172	7.48	0.13 957	0.11 462	2446
1.025	174	7.57	0.13 958	0.11 462	2469
1.03	184	8	0.13 958	0.11 463	2618
1.04	228	9.91	0.13 956	0.11 466	3256

En reprenant la même expérience avec cette fois-ci la concentration au bord 10^{18} au lieu de 10^{20} (0.176 au lieu de 17.6 en normalisé) on obtient

ALGORITHME 4. Relaxation non linéaire EGSN (SANS CLUSTERING)					$\tau = 1.25 \text{ mn}$
β	BALAYAGES		Prof. Jonction	D. ff. latérale	C P U
	TOTAL	MOYENNE			
1	115	5	0.05950	0.04895	935
1.01	120	5.22	0.05950	0.04895	975
1.02	146	6.35	0.05950	0.04895	1195
1.025	164	7.13	0.05950	0.04895	1345
1.03	181	7.87	0.05950	0.04895	1490

Dans le dernier cas la diffusion est moins importante que dans les cas précédents et il est tout à fait normal que les paramètres de relaxation soient plus proches de 1.

d. Comparaison des temps de calcul sur VAX 11/780

Nous donnons sur le tableau suivant, les temps de calcul (C.P.U) relatifs au problème test a), c'est à dire, diffusion d'Arsenic par prédépôt à 1000°C durant 20 mn, et ce pour la plupart des algorithmes décrits au §3.

Le pas de temps retenu est 1.25 mn (pas de temps maximum). Les temps de calcul sont donnés sur ordinateur VAX 11/780 qui est la machine la plus couramment utilisée dans le domaine.

ALG: n°	Description.	TEMPS CPU VAX 11/780
1	Linearisation	134 s
2	Point fixe	250 s
3	Variante itérative de linearisation	214 s
4	Relaxation non linéaire (EGSN)	500 s
5	Newton-Raphson	421 s
6	Variante itérative de Newton-Raphson	315 s
9	Newton itératif (formulation intégrale)	368 s

L'algorithme 1 est le plus rapide mais les résultats obtenus avec un tel algorithme sont peu fiables.

e. Représentations graphiques des résultats

On a représenté sur la figure 39, les isovalues de la concentration d'Arsenic (10, 1, 0.1, 0.01... en valeurs normalisées) pour le résultat obtenu lors de la simulation du problème test (a). (Prédépôt d'Arsenic à 1000°C durant 20 mn ; concentration au bord 17.6).

La ligne en trait épaissi (équipotentielle particulière) représente la jonction.

Sur les figures 40 et 41 on a représenté des vues tridimensionnelles de la même solution.

La figure 43 représente la distribution d'Arsenic que l'on obtient après implantation ionique (dose 10^{14} et énergie 80 Kev).

Cette concentration d'As, sert d'état initial au problème de diffusion (pb test b)), et les figures 44 et 45 donnent la concentration d'impuretés que l'on obtient après redistribution (20 mn à 1000°C).

La figure 46 donne le résultat pour le problème test c) (prédépôt de bore à 1100°C, durant 20 mn).

4.6 . Extension - Diffusion du phosphore

Si l'on considère la diffusion du phosphore dans le silicium, un modèle simplifié du coefficient de diffusion est représenté sur la figure 47. Ce coefficient dépend de la concentration (comme pour l'Arsenic et le Bore), mais cette fonction présente une discontinuité (pour la valeur 5. de la concentration en valeur normalisée).

Nous n'avons testé sur ce problème, que l'algorithme 3 (variante itérative de linéarisation), car il ne fait pas intervenir de dérivée du coefficient de diffusion.

Nous avons simulé un prédépôt de phosphore avec une valeur au bord de 10, pendant 6 mn (le phosphore diffuse beaucoup plus vite que le Bore ou l'Arsenic).

La convergence de l'algorithme a été un peu plus difficile mais a quand même été réalisée et l'on peut voir sur les fig. 48-50 le résultat obtenu. (on peut remarquer le plateau et le "kink", typiques de la diffusion du phosphore).

4.7 Validation des résultats

Obtenir directement par l'expérience des profils bidimensionnels de diffusion sous masque d'oxyde est une tâche très difficile. La méthode utilisée dans quelques laboratoires consiste à employer un microscope électronique à transmission de très haute résolution. L'échantillon observé sur la tranche est aminci par un amincisseur ionique. Seules quelques photos de ce type existent au monde. Par contre plusieurs méthodes expérimentales existent pour obtenir des profils unidimensionnels (SIMS, Spreading-résistance, etc...).

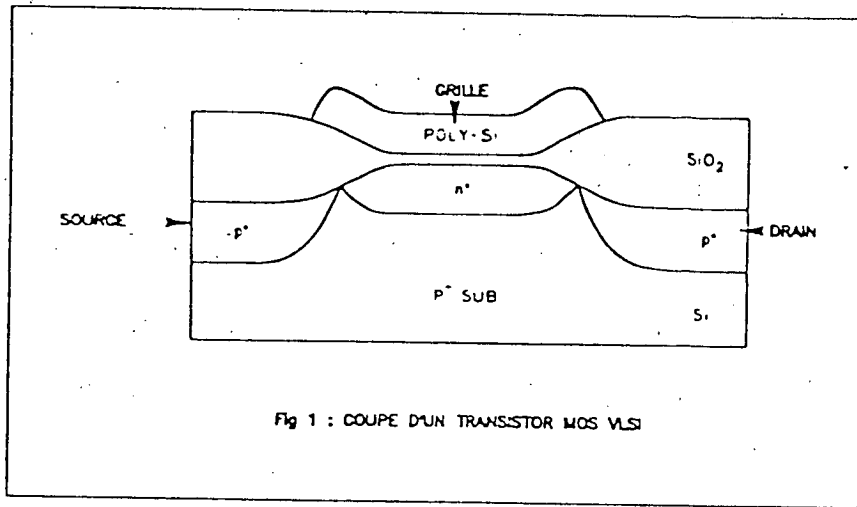
Plus qu'un accord parfait théorie-expérience, c'est la forme des profils théoriques qui doit coïncider avec l'expérience. En effet les valeurs numériques utilisées sont obtenues par "filtrage" de courbes et sont susceptibles de varier d'un four à l'autre. Un "calage" des différents paramètres est nécessaire lorsqu'on passe d'un type de four à l'autre.

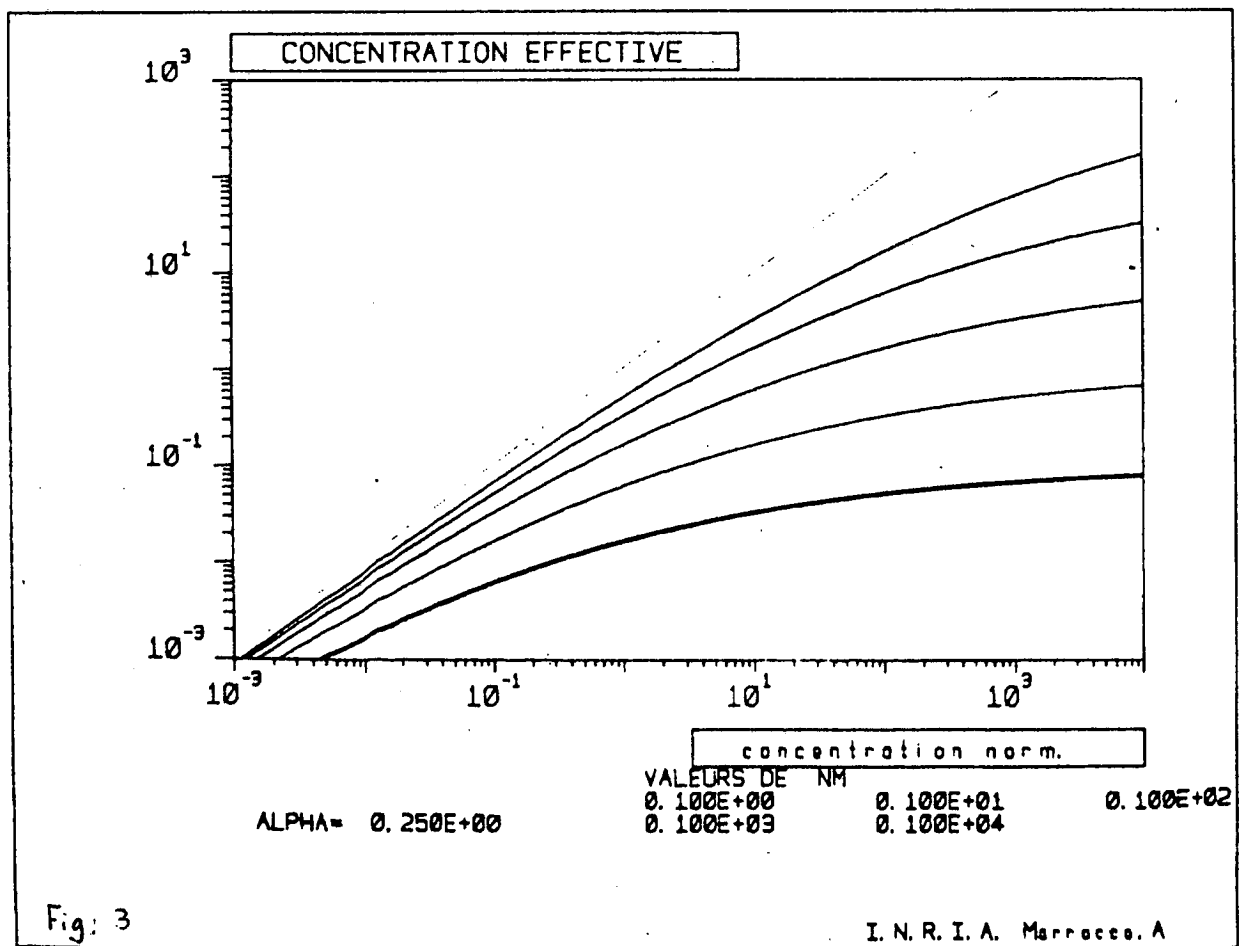
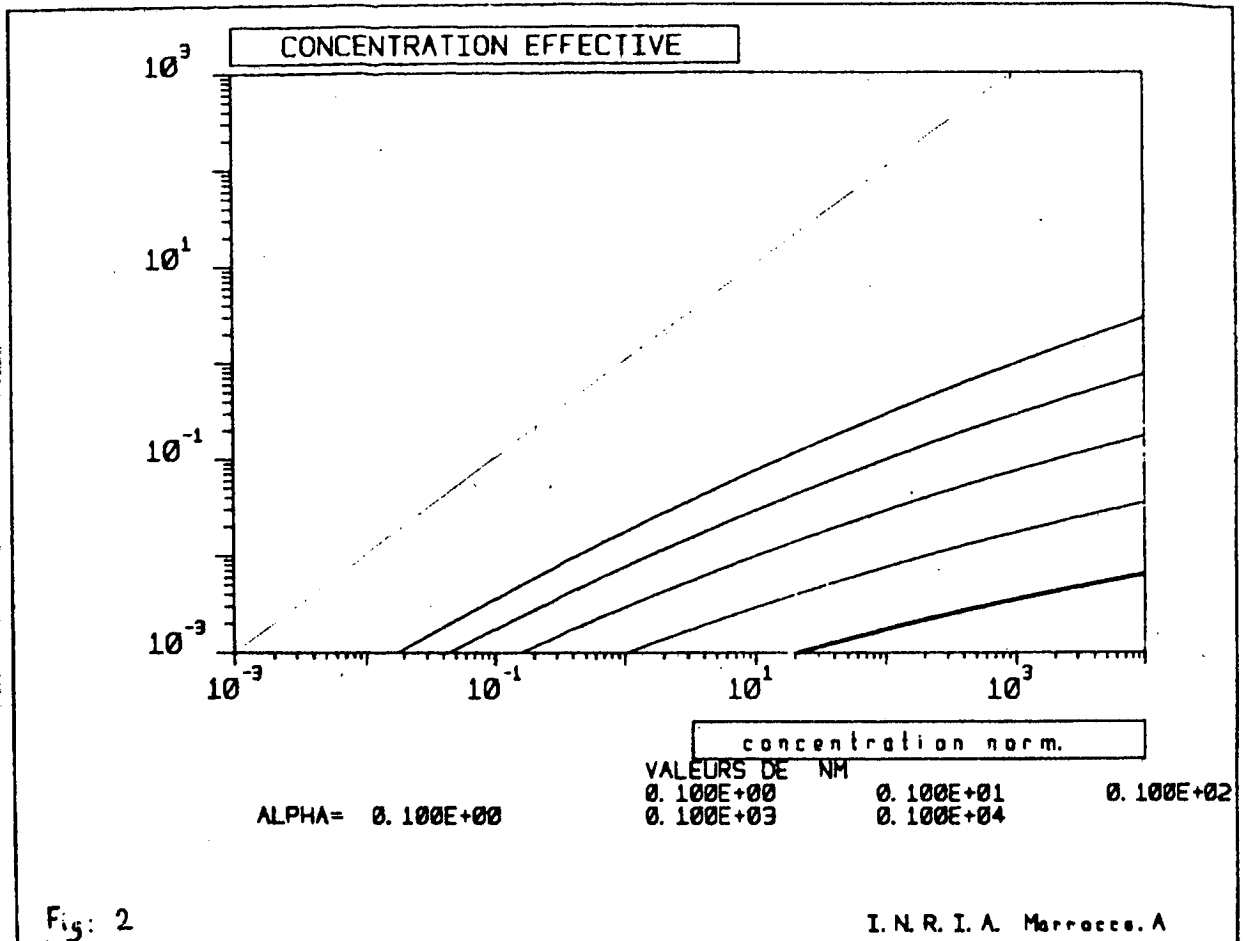
On donne sur la figure 51 la comparaison (dans la zone unidimensionnelle), des résultats de simulation du problème test a), (trait plein), lorsqu'on considère ou pas le phénomène de clustering et des résultats de mesures (marqués par des points).

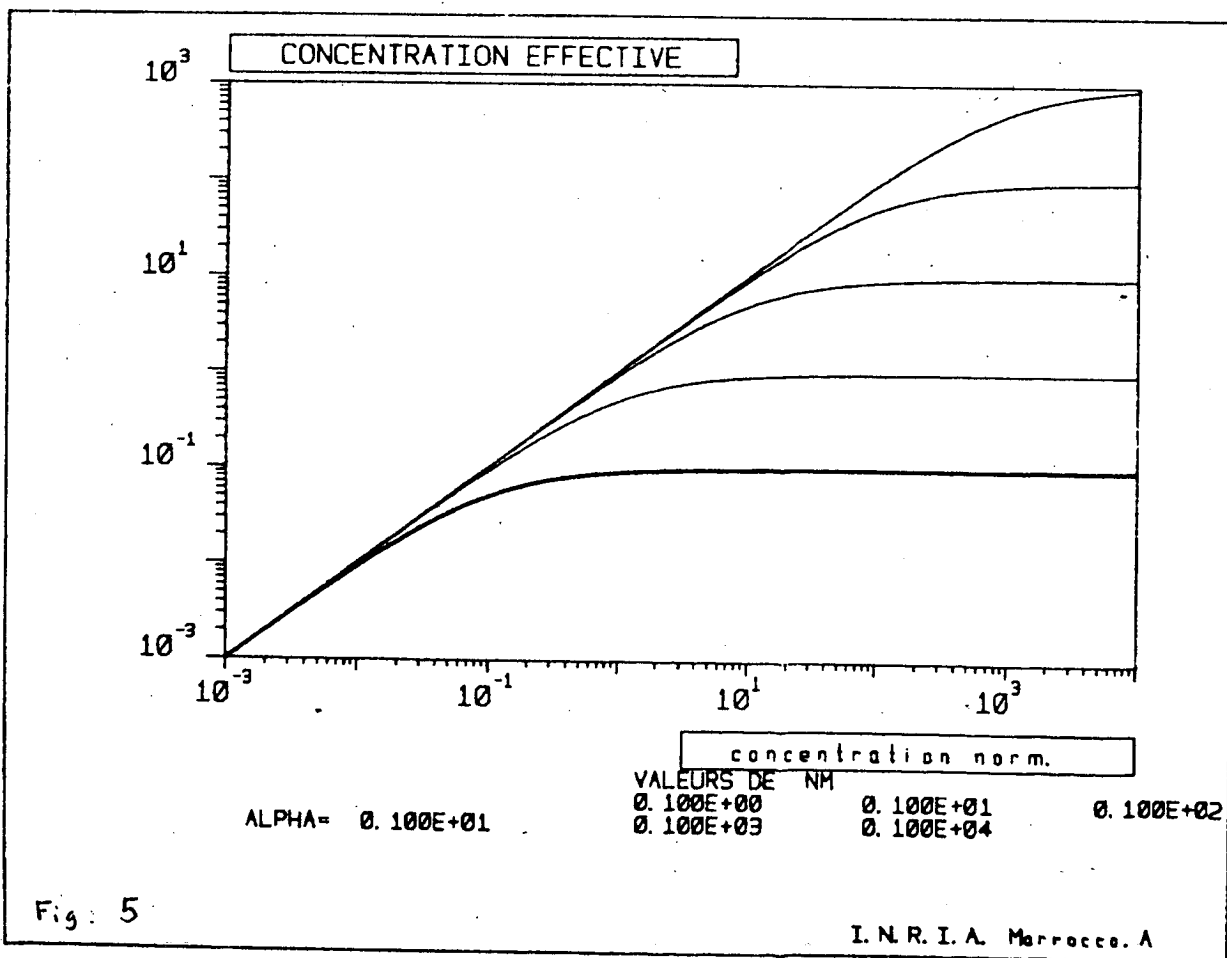
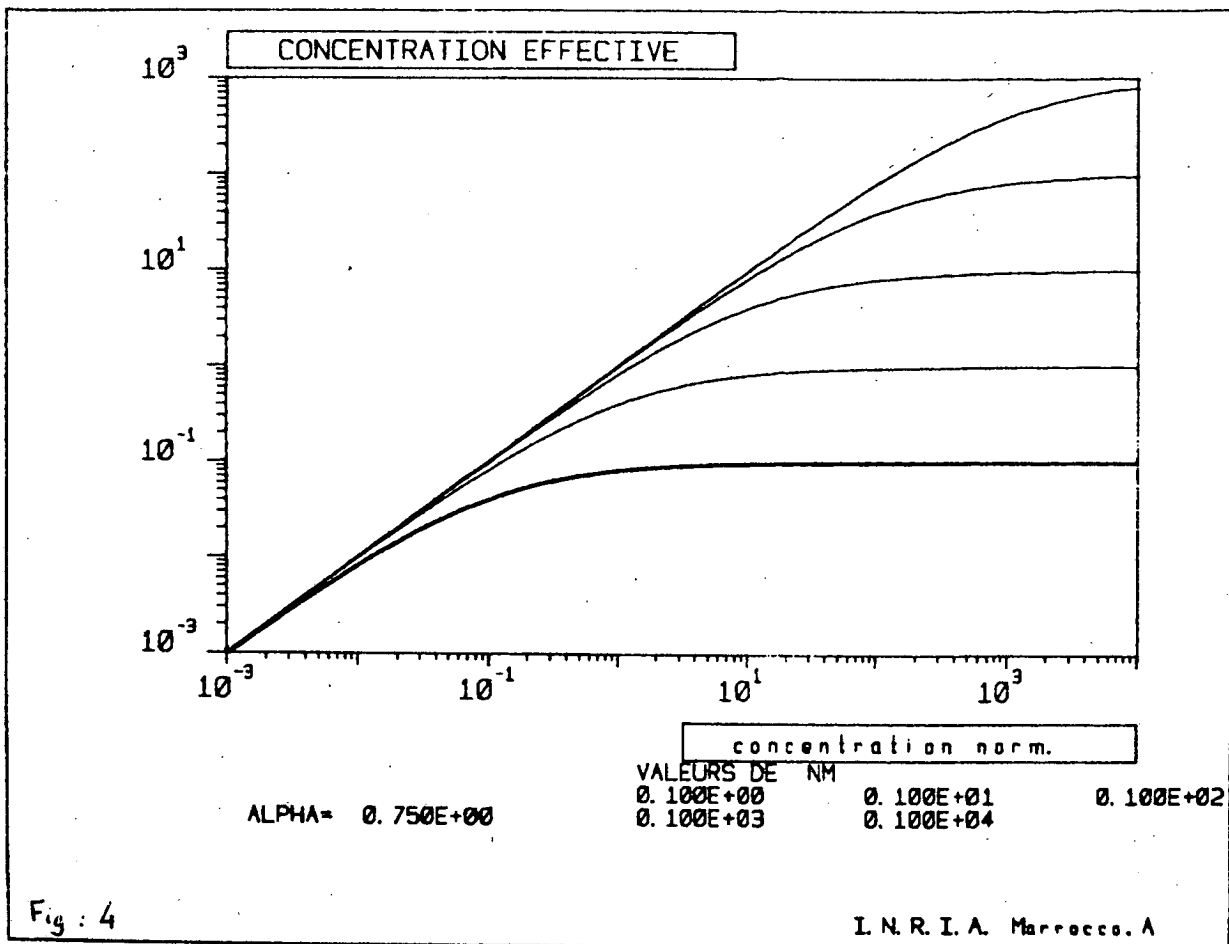
Le tableau ci-dessous permet de comparer les résultats de simulation et de mesures (relatives à la profondeur de jonction) pour les cas tests a) et c)

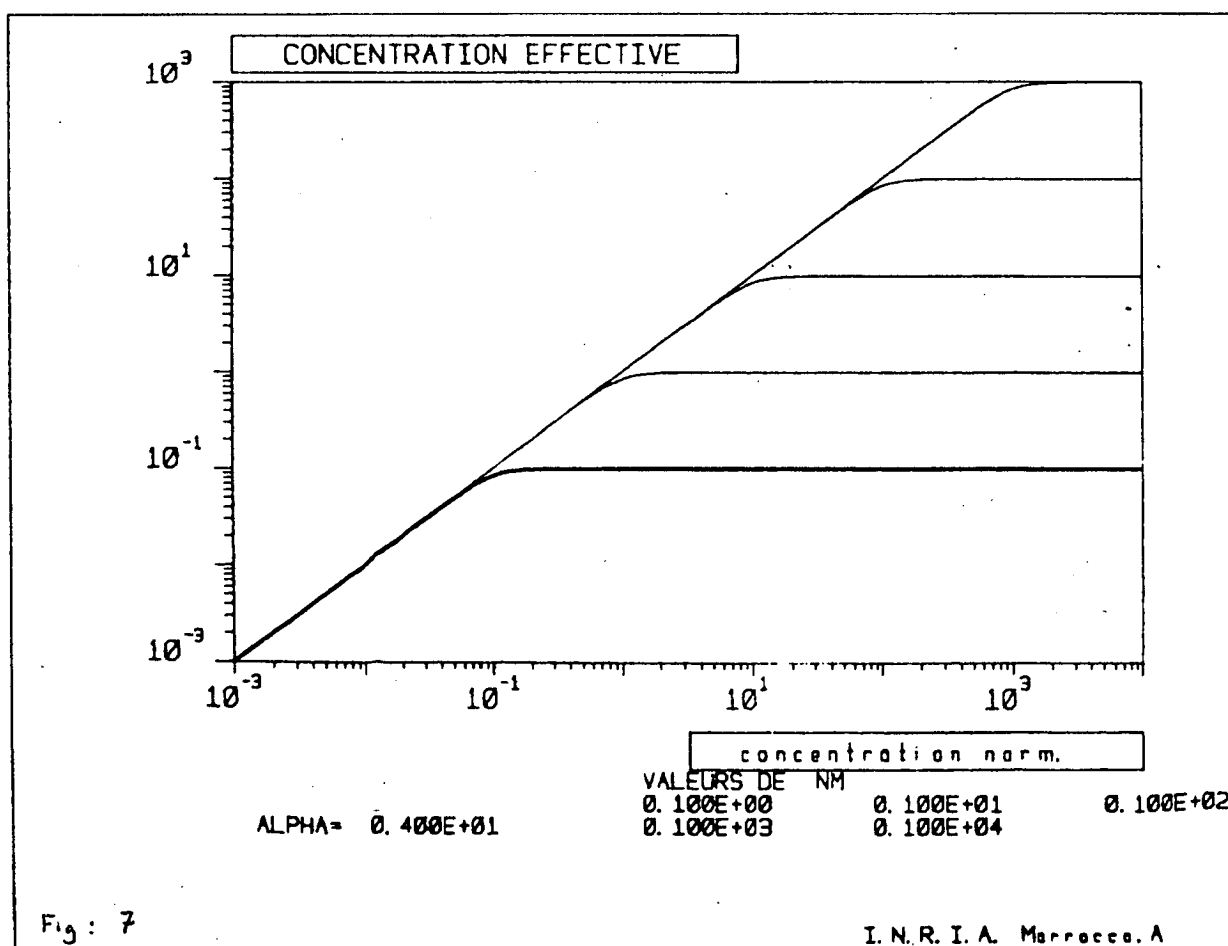
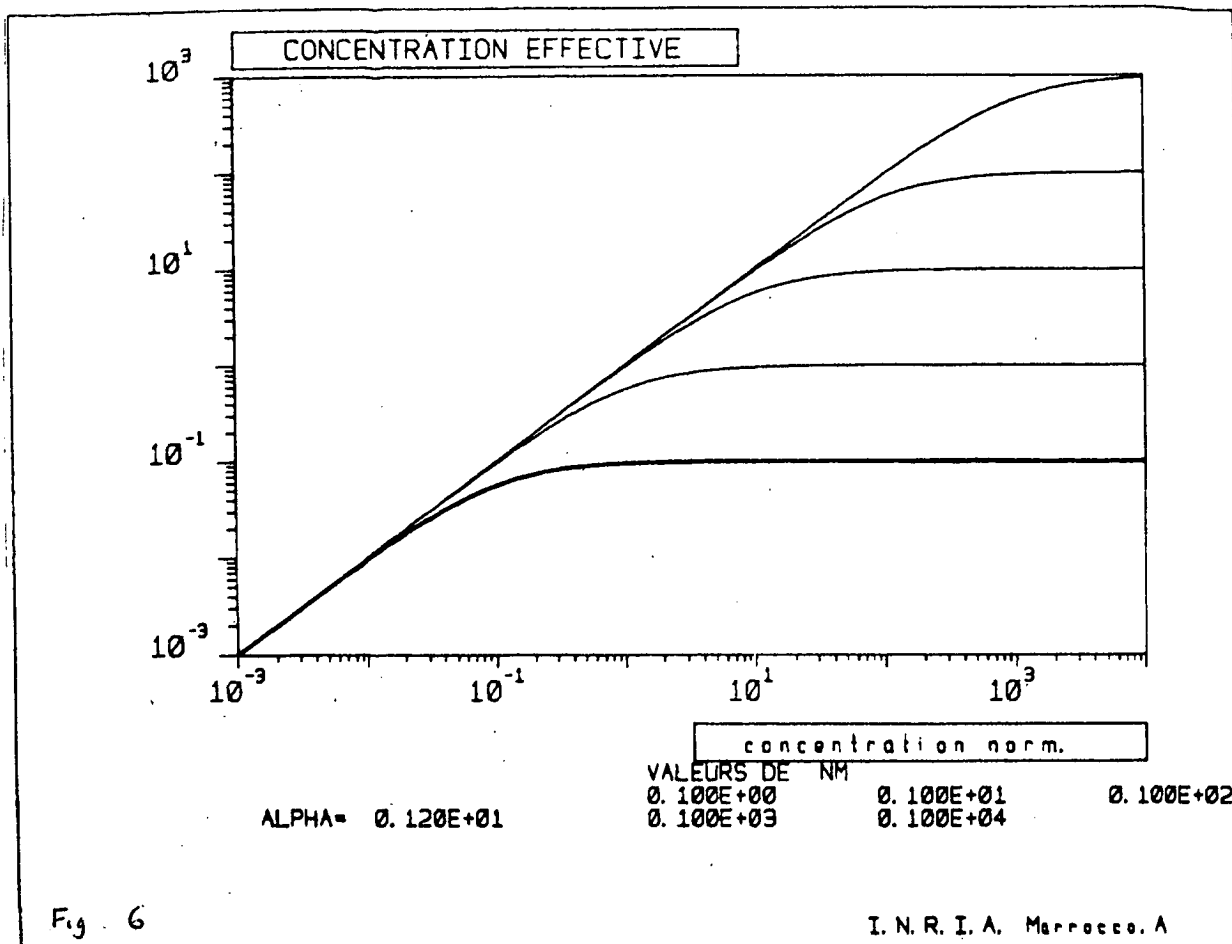
Pb test	PROFONDEUR DE JONCTION	
	Simulation numérique	Expérience
a)	0.13091	0.13
c)	2.452	2.29

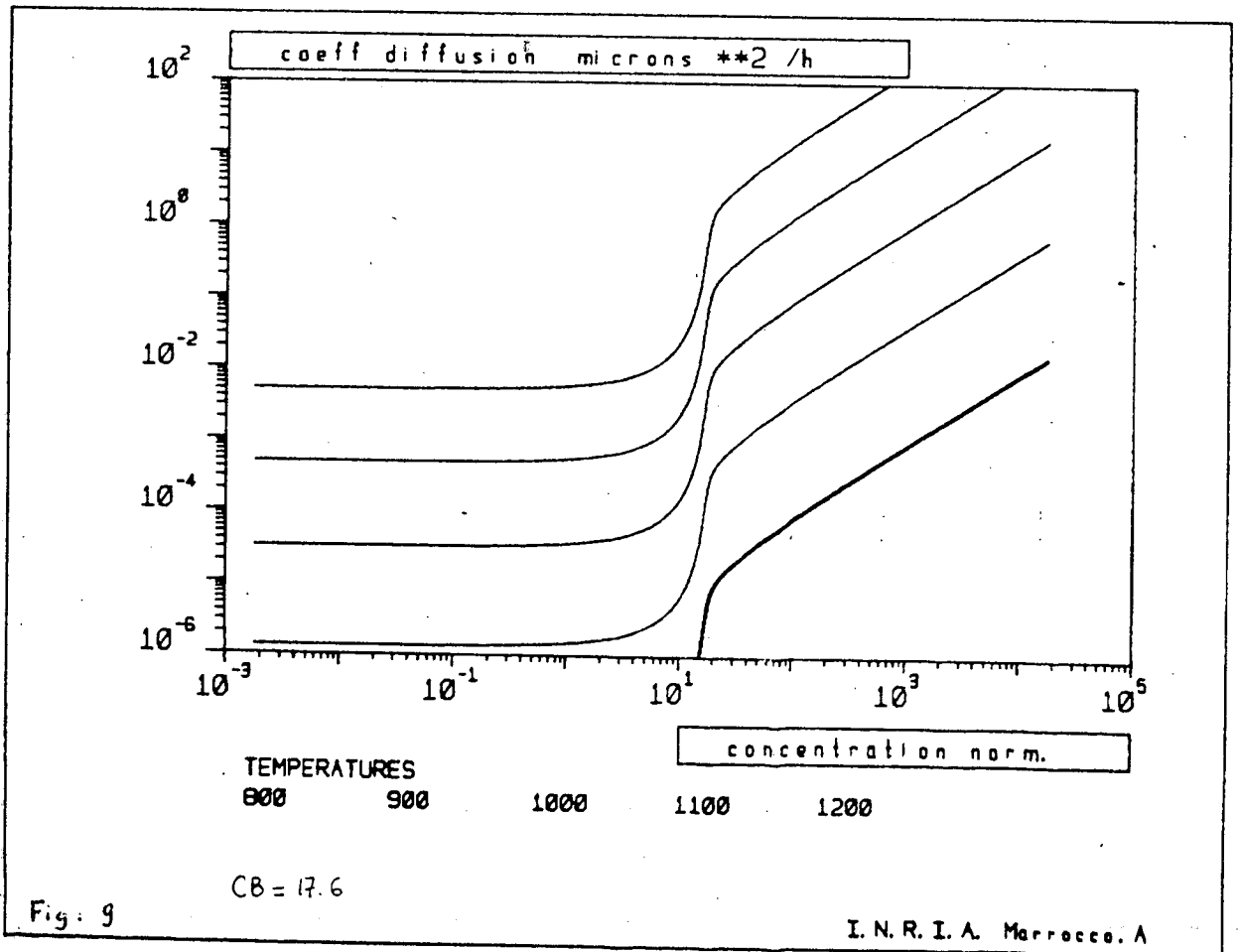
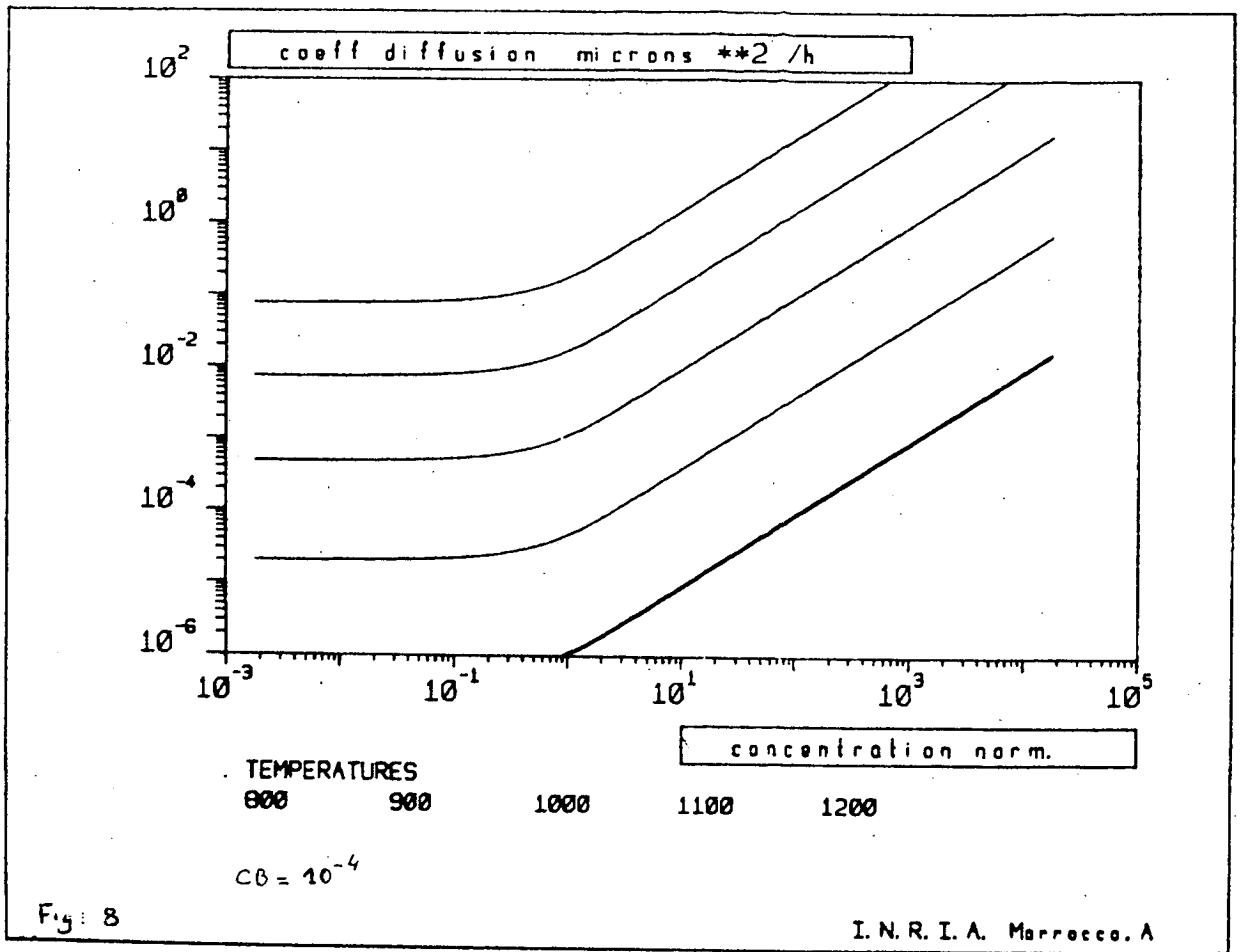
En fait, la véritable validation des résultats sera obtenue par la comparaison des caractéristiques électriques (mesurables très précisément) expérimentale avec celles obtenues par le couplage de deux logiciels de simulation de fabrication et de fonctionnement électrique (à condition d'avoir des logiciels de simulation du fonctionnement électrique efficaces et sûrs).

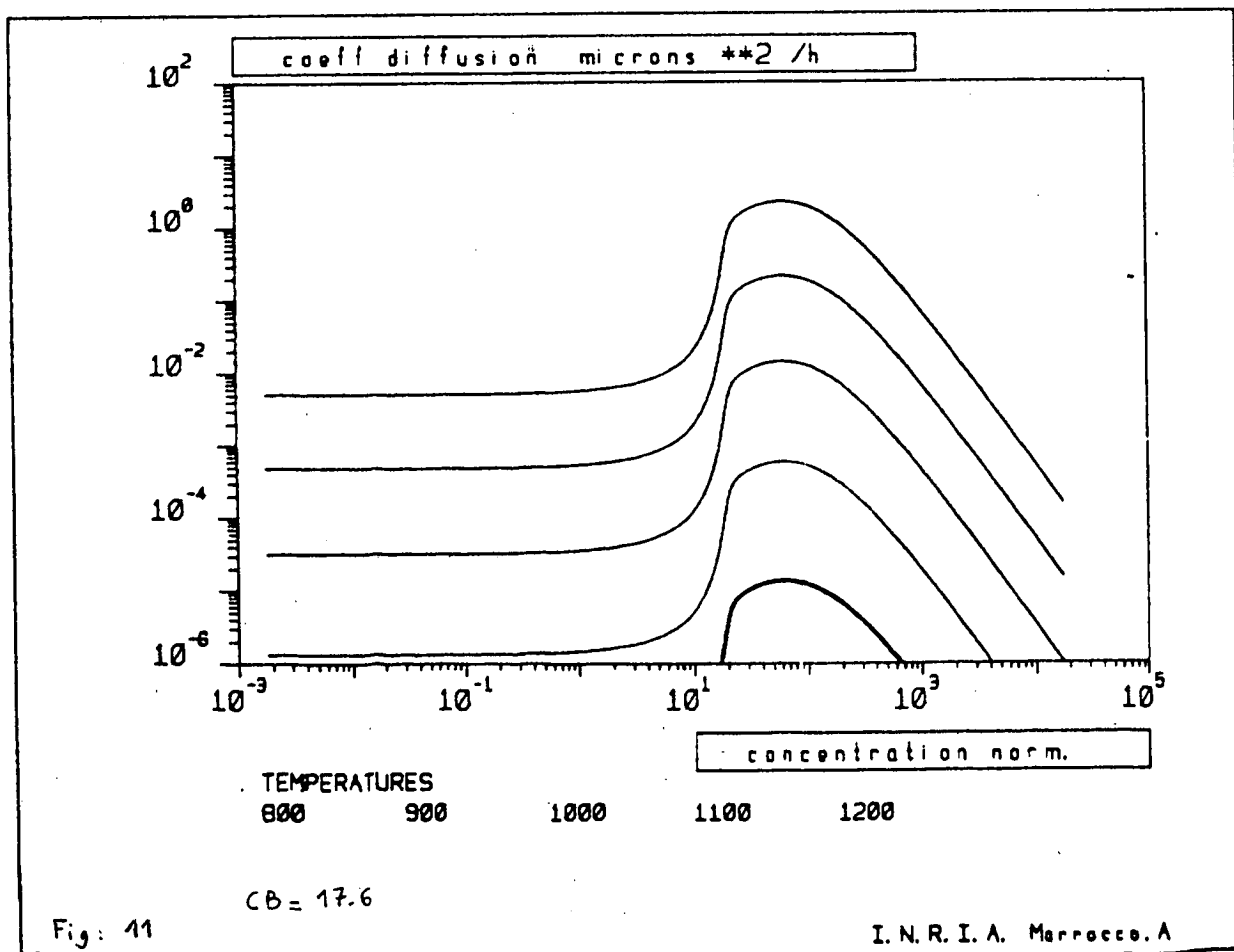
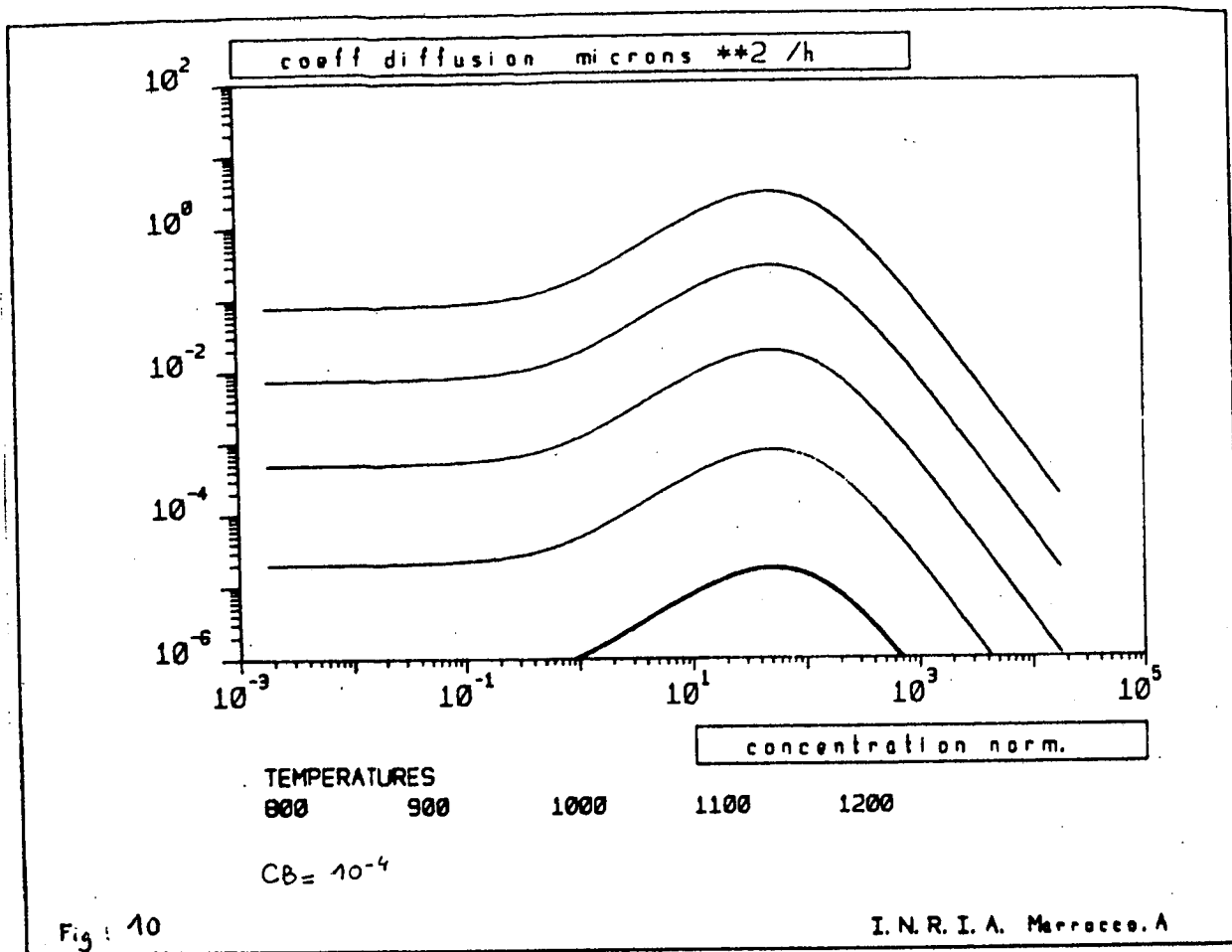


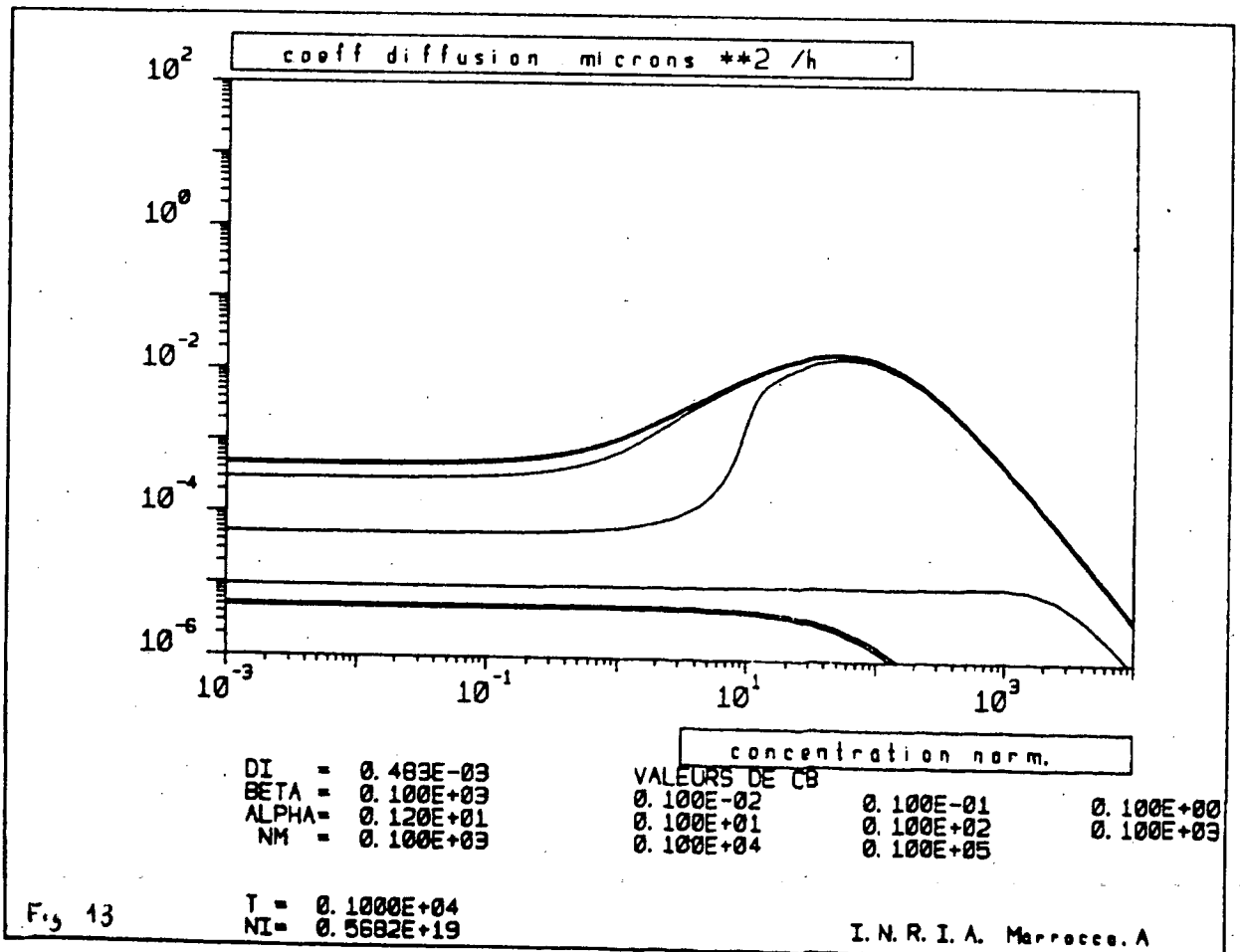
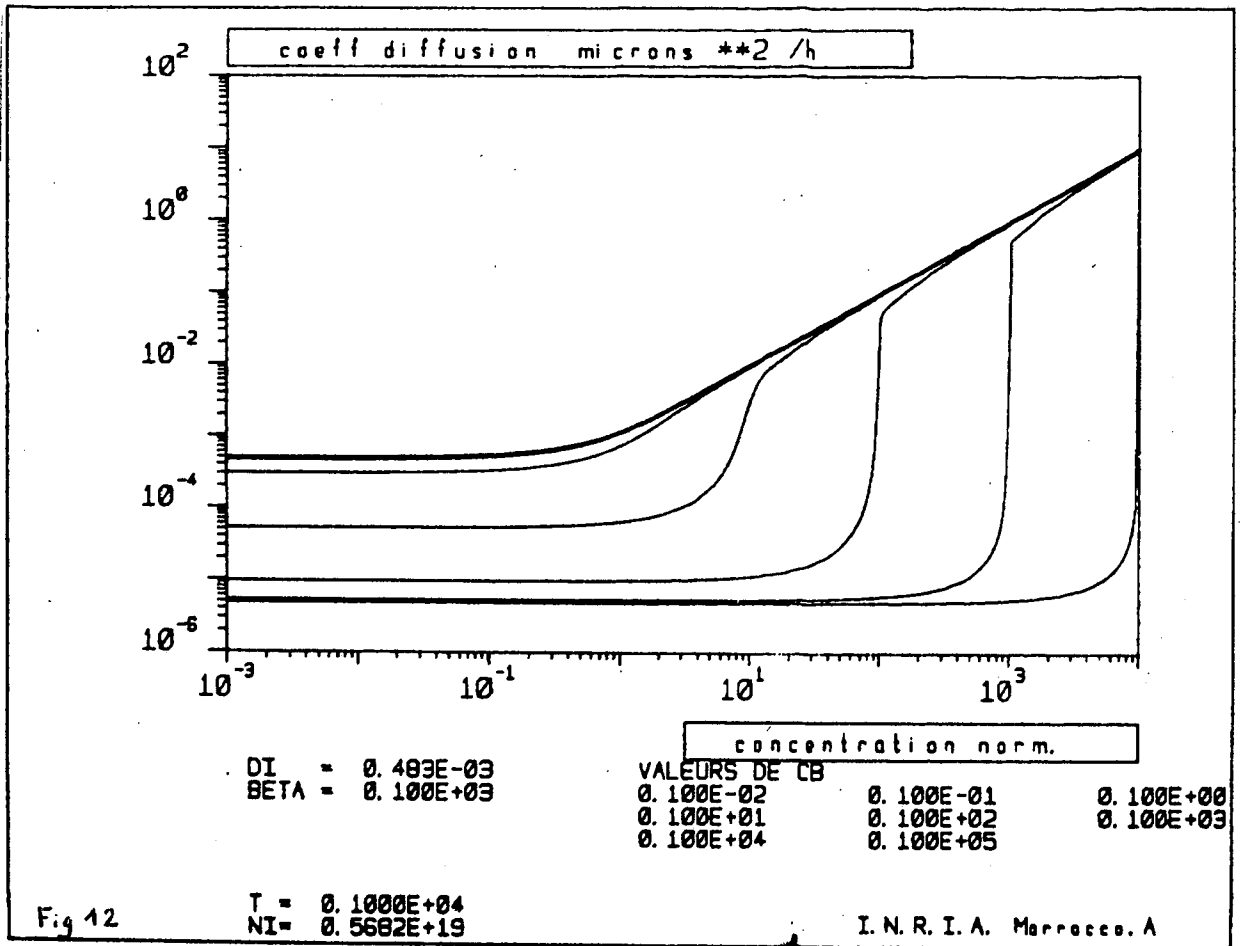


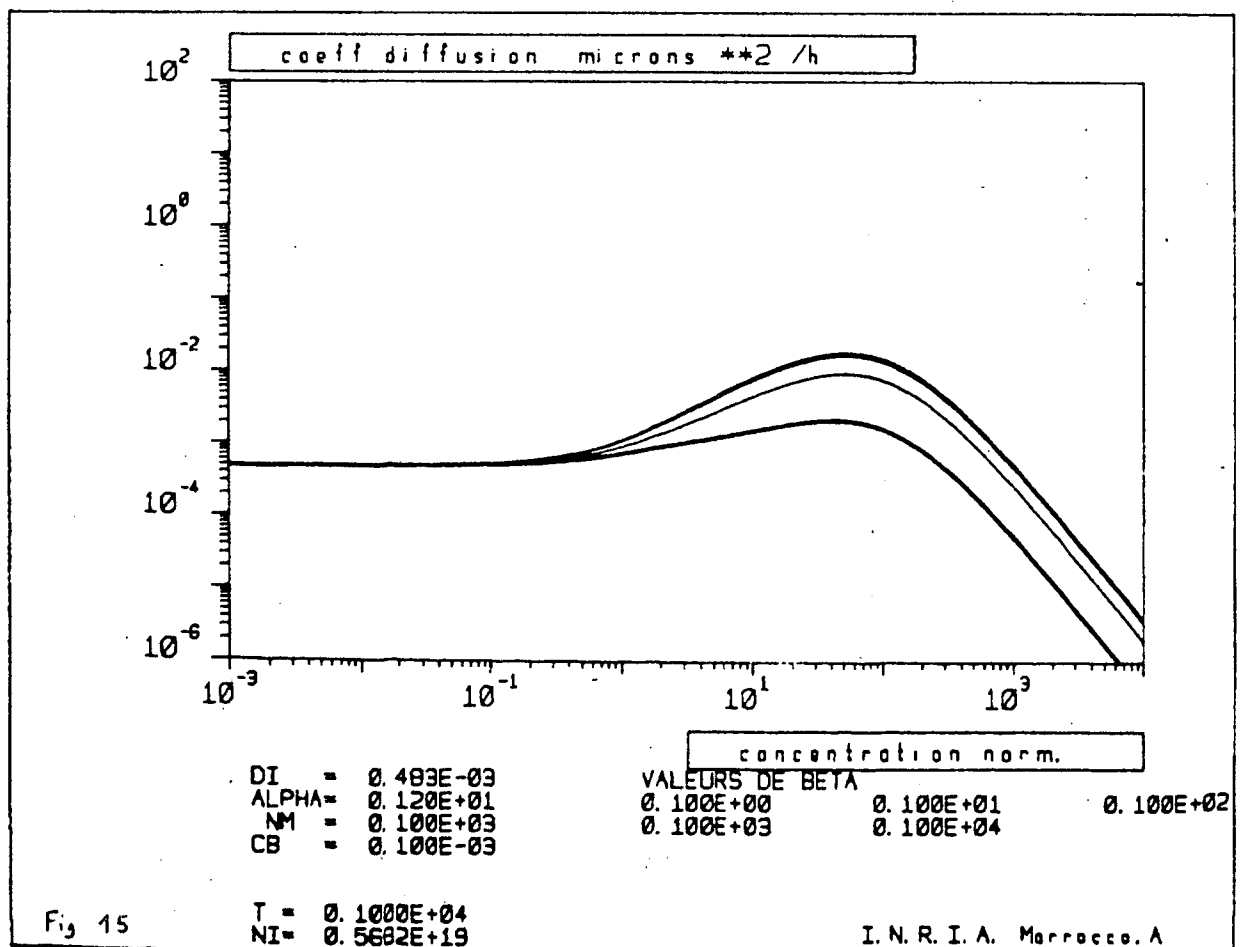
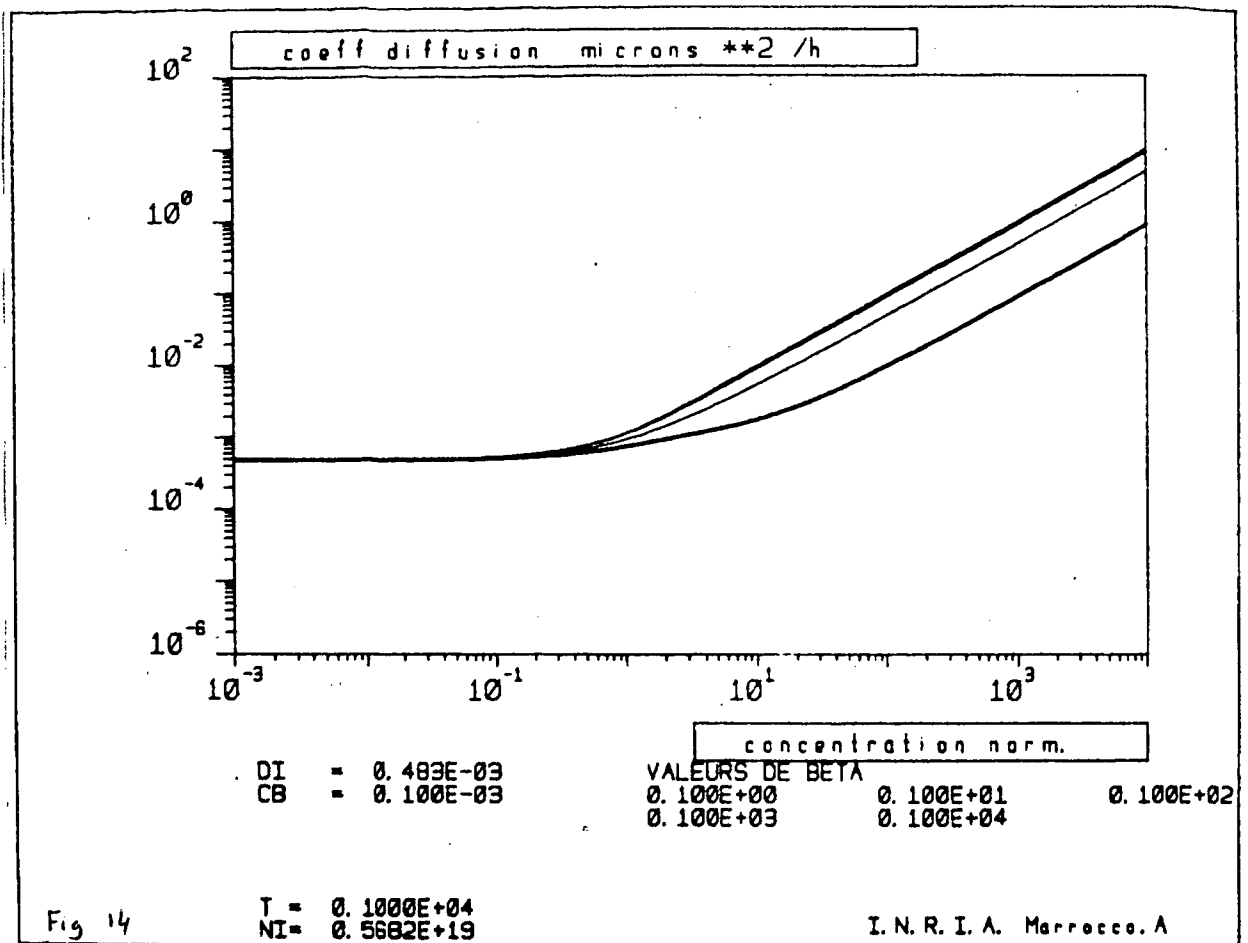


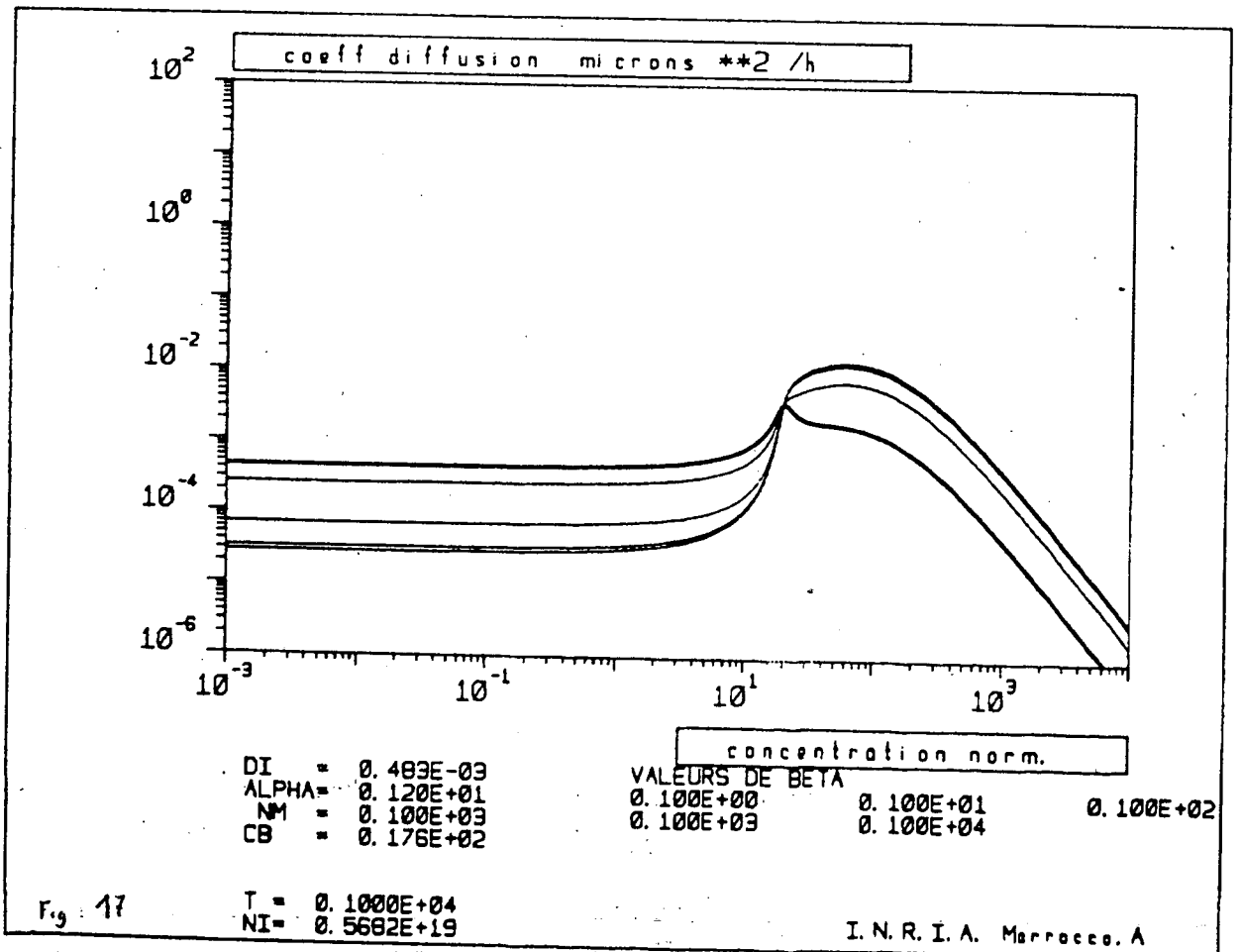
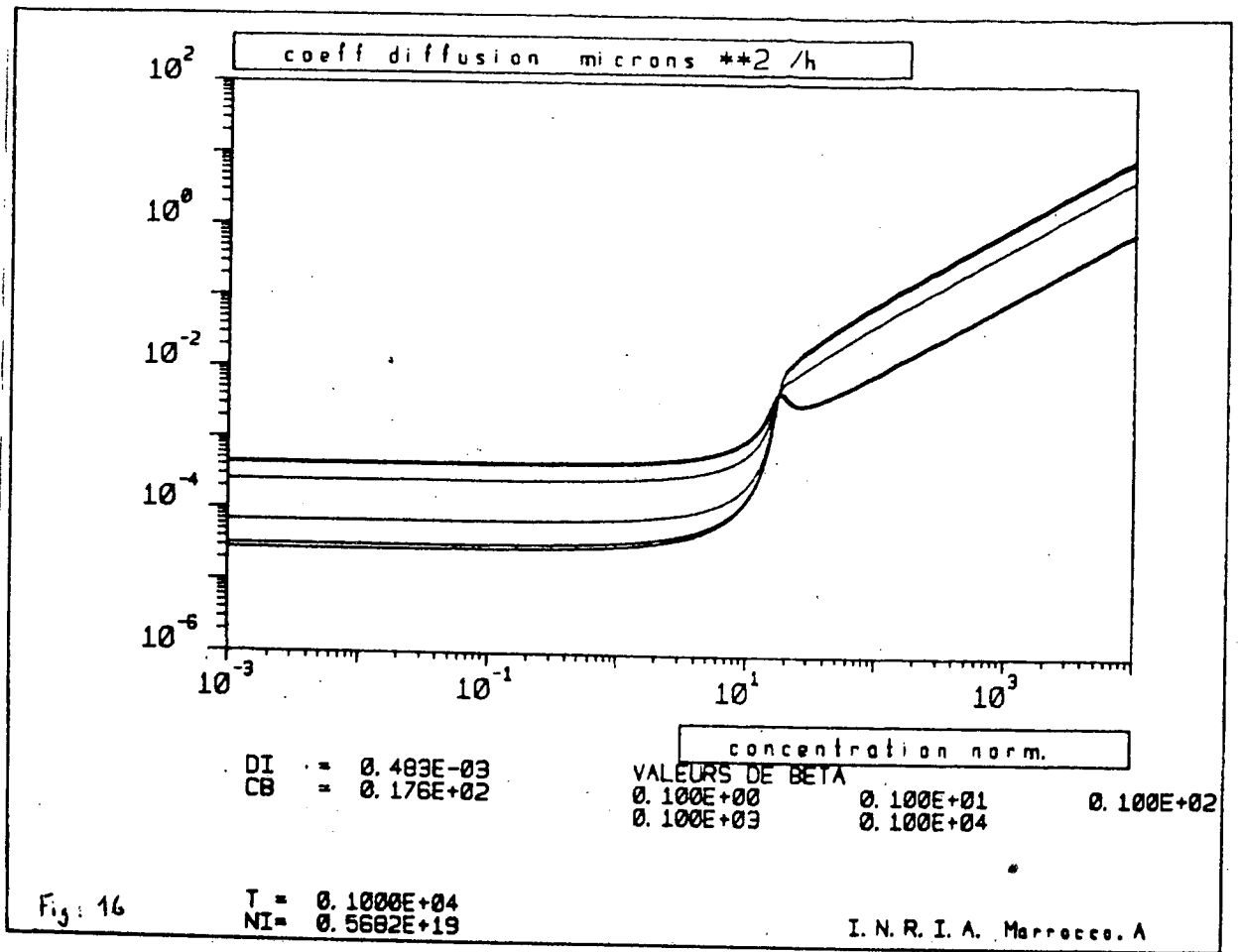


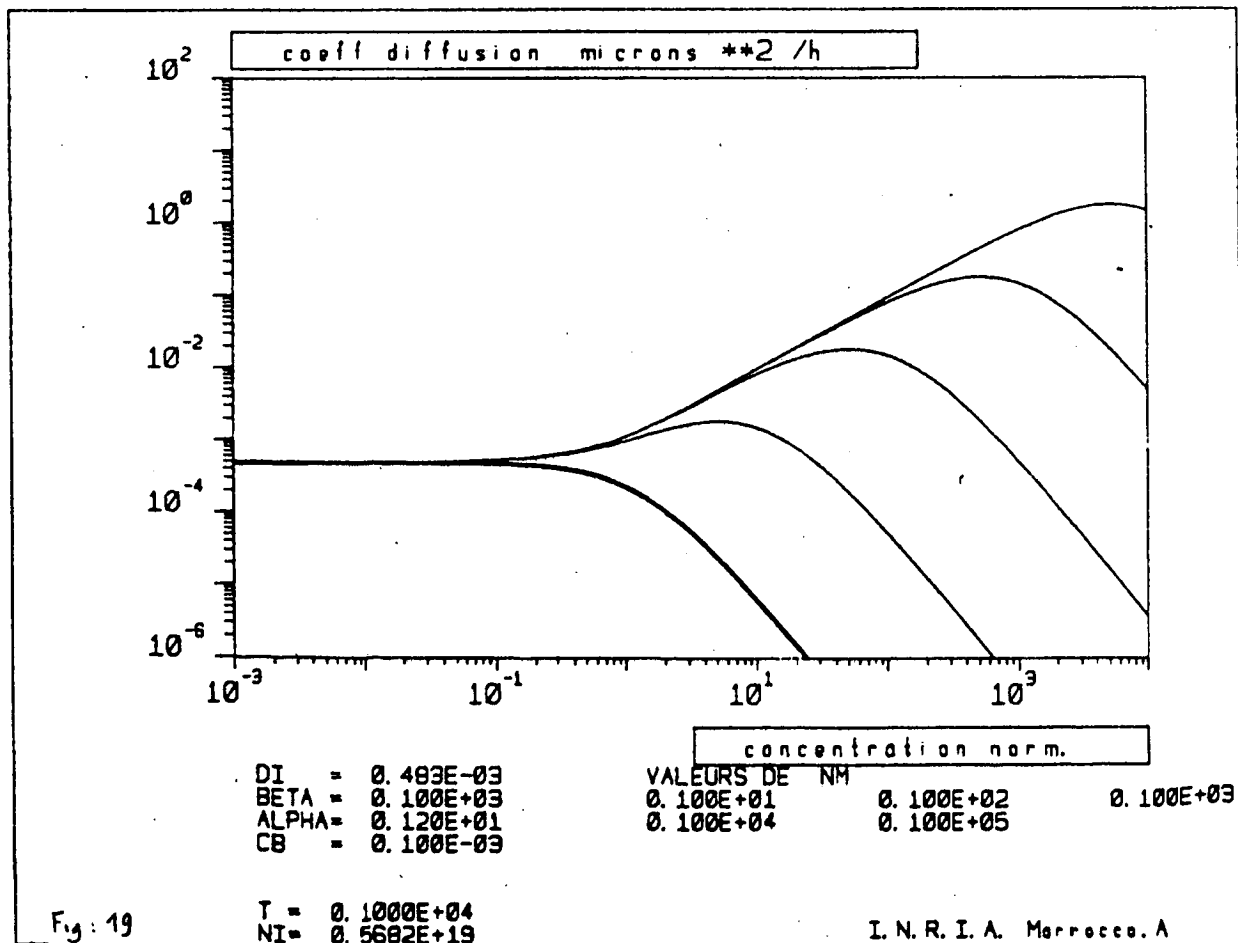
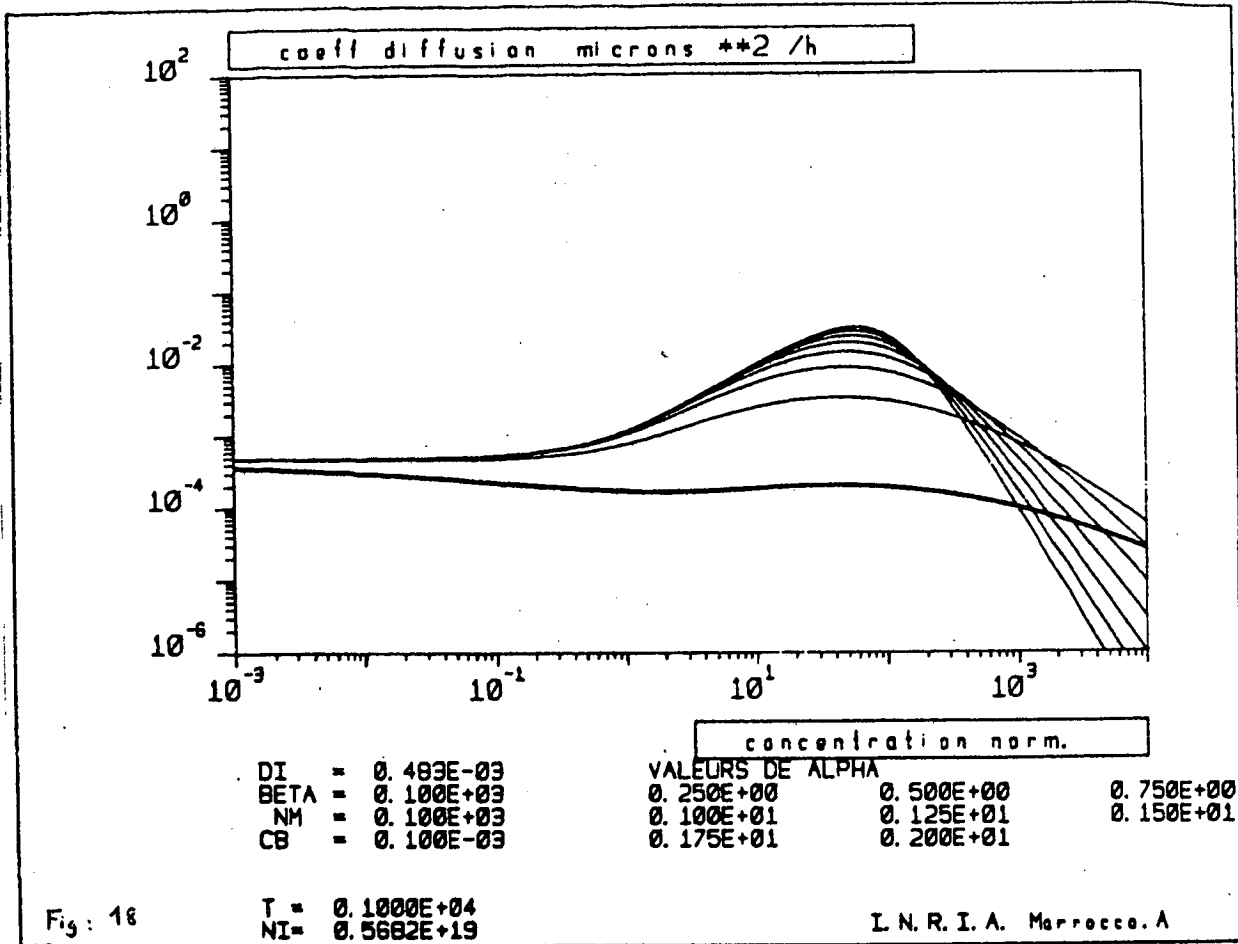


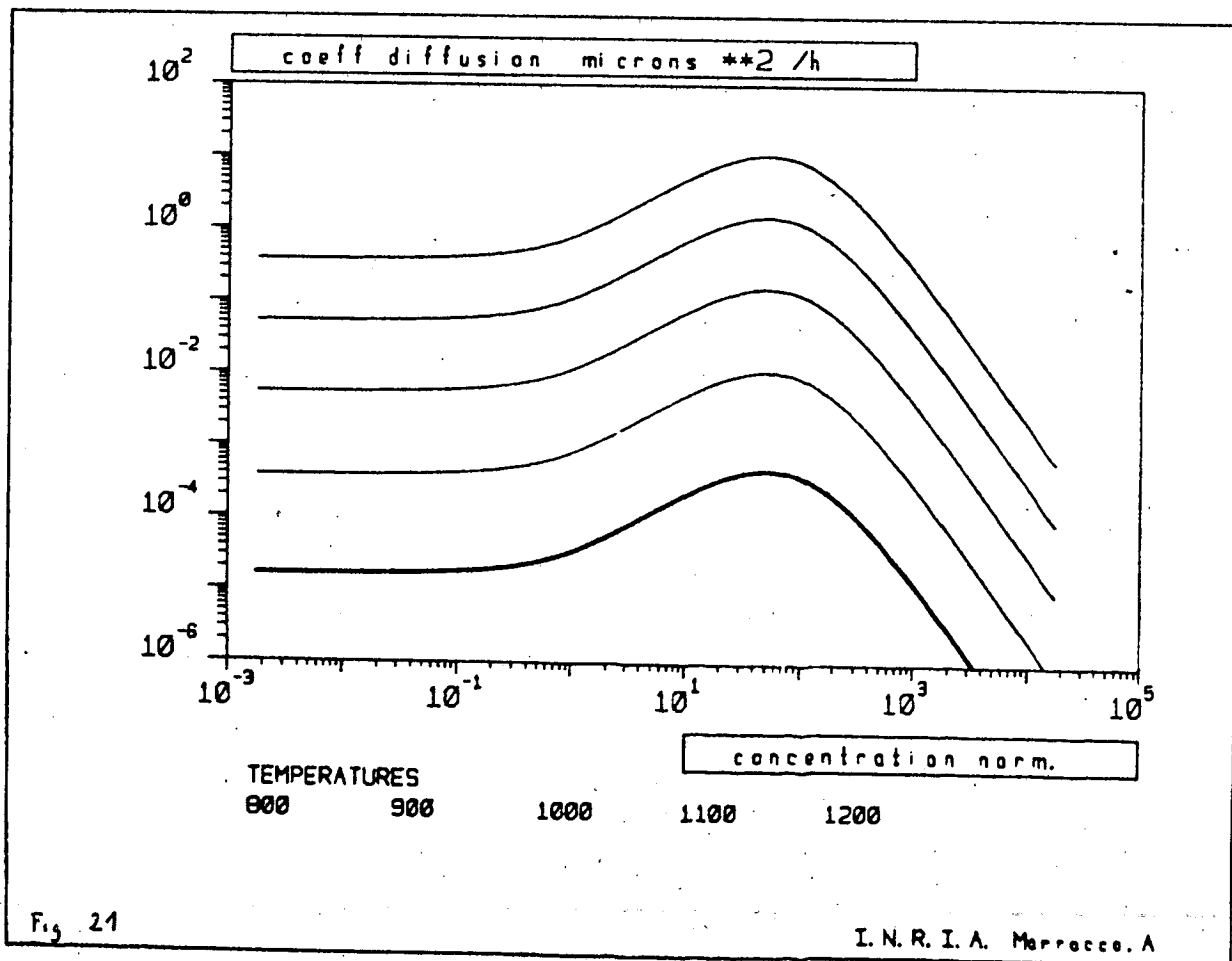
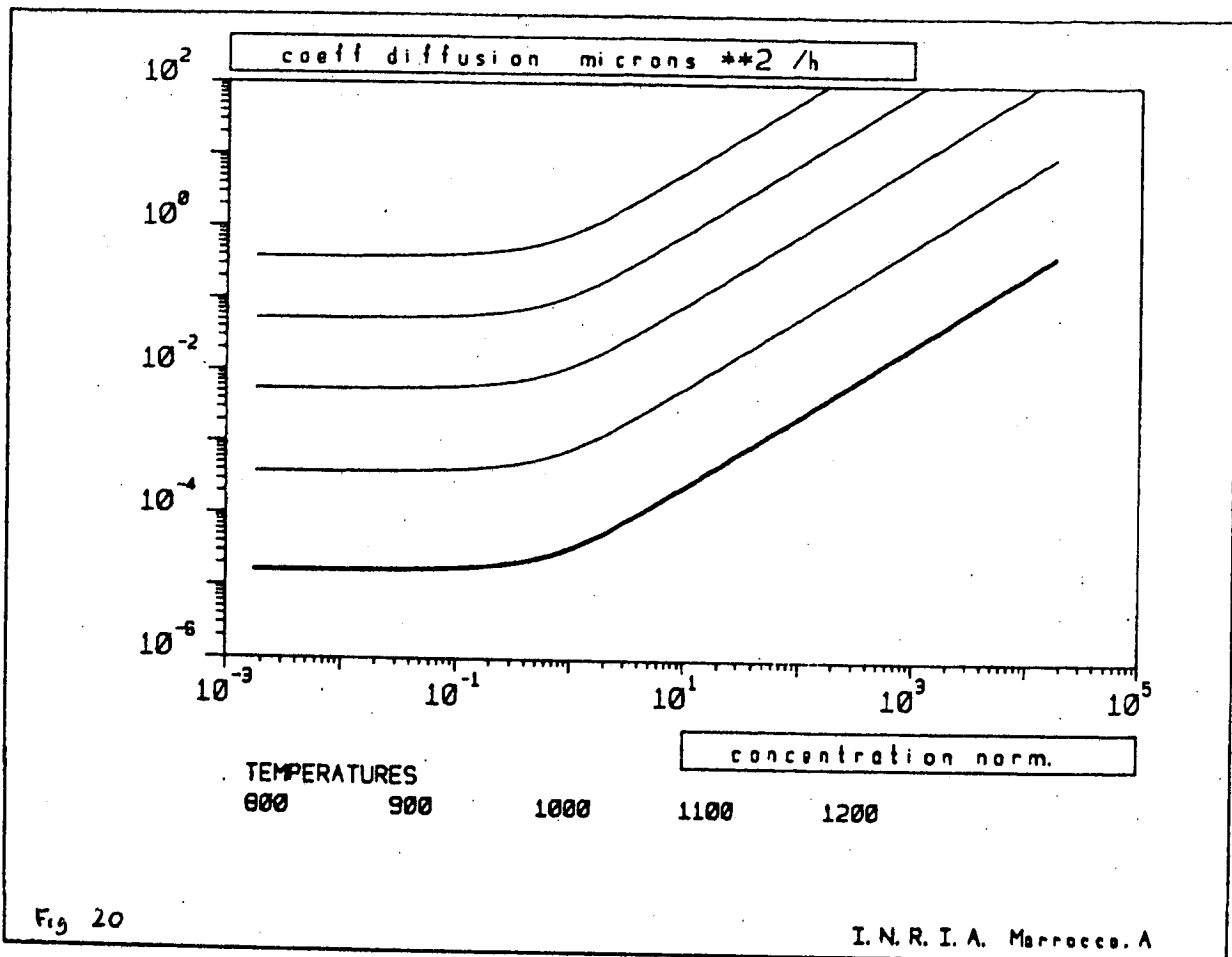


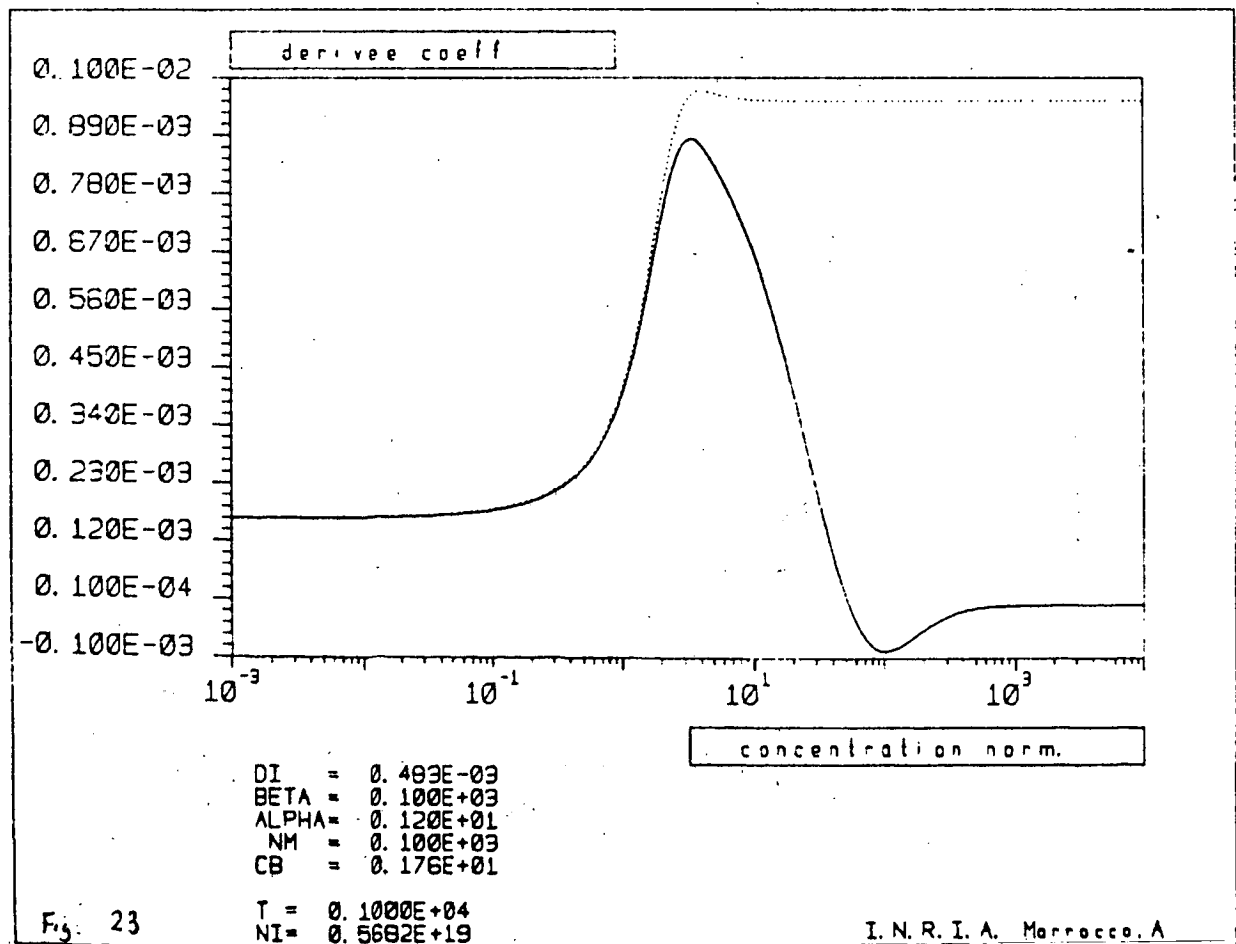
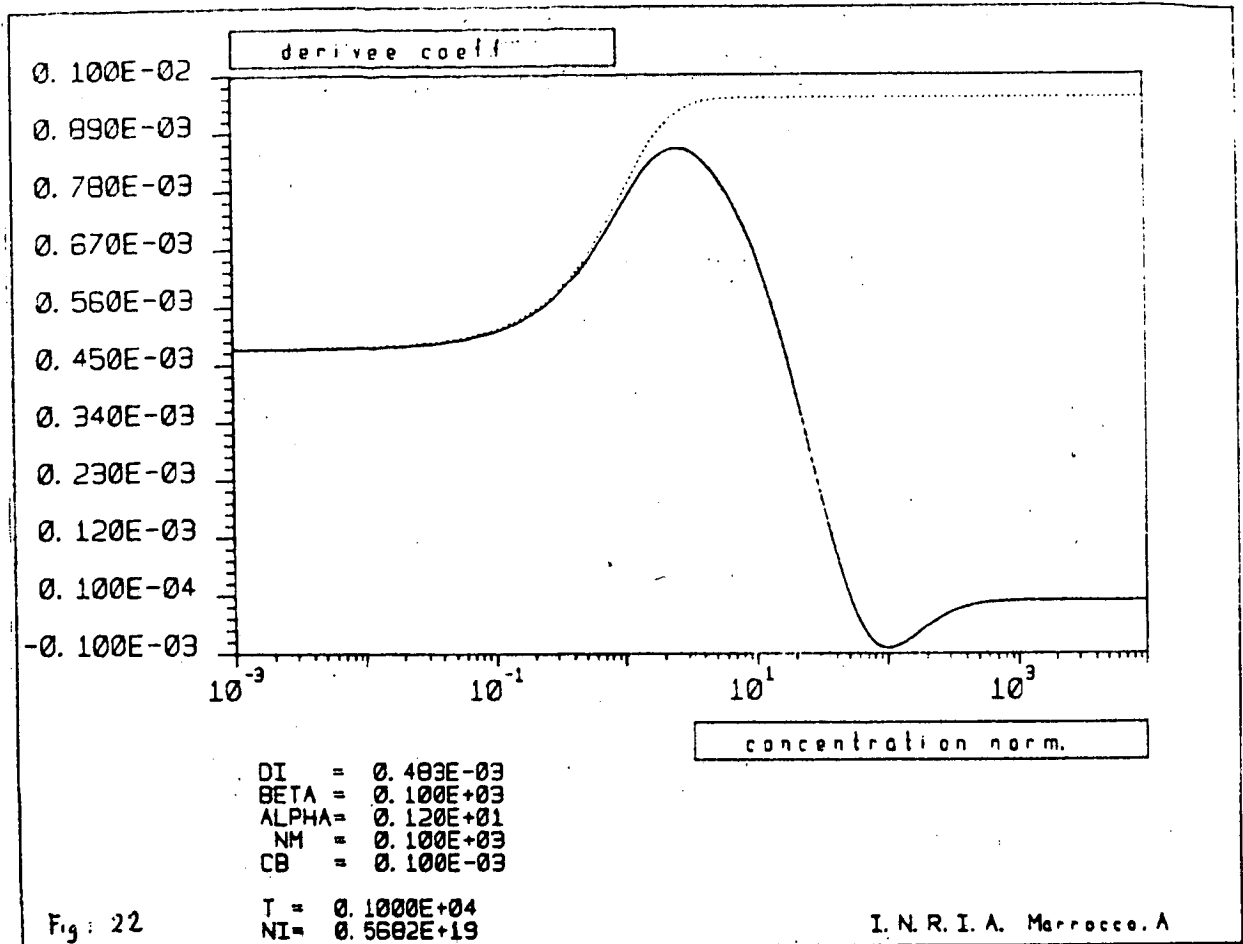


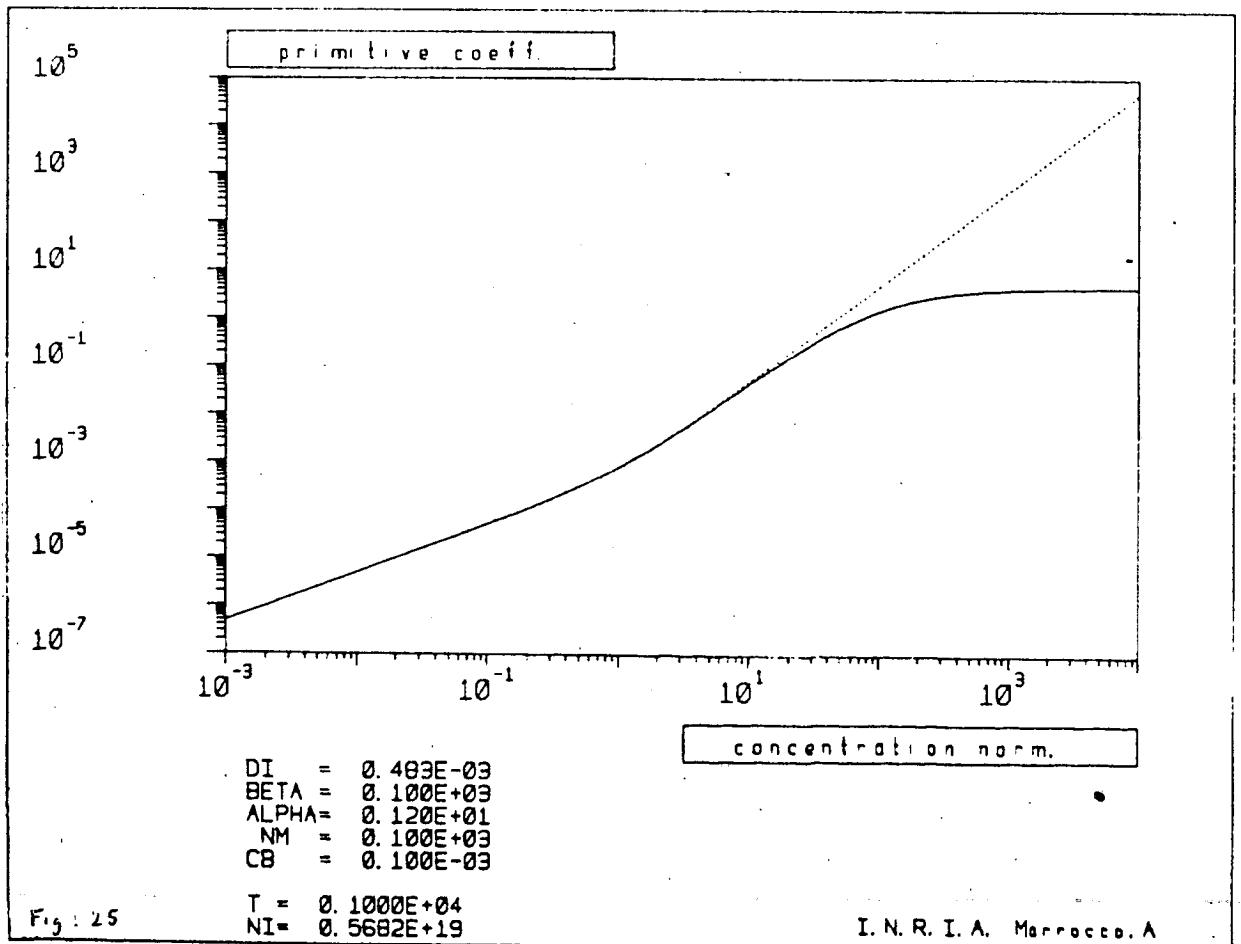
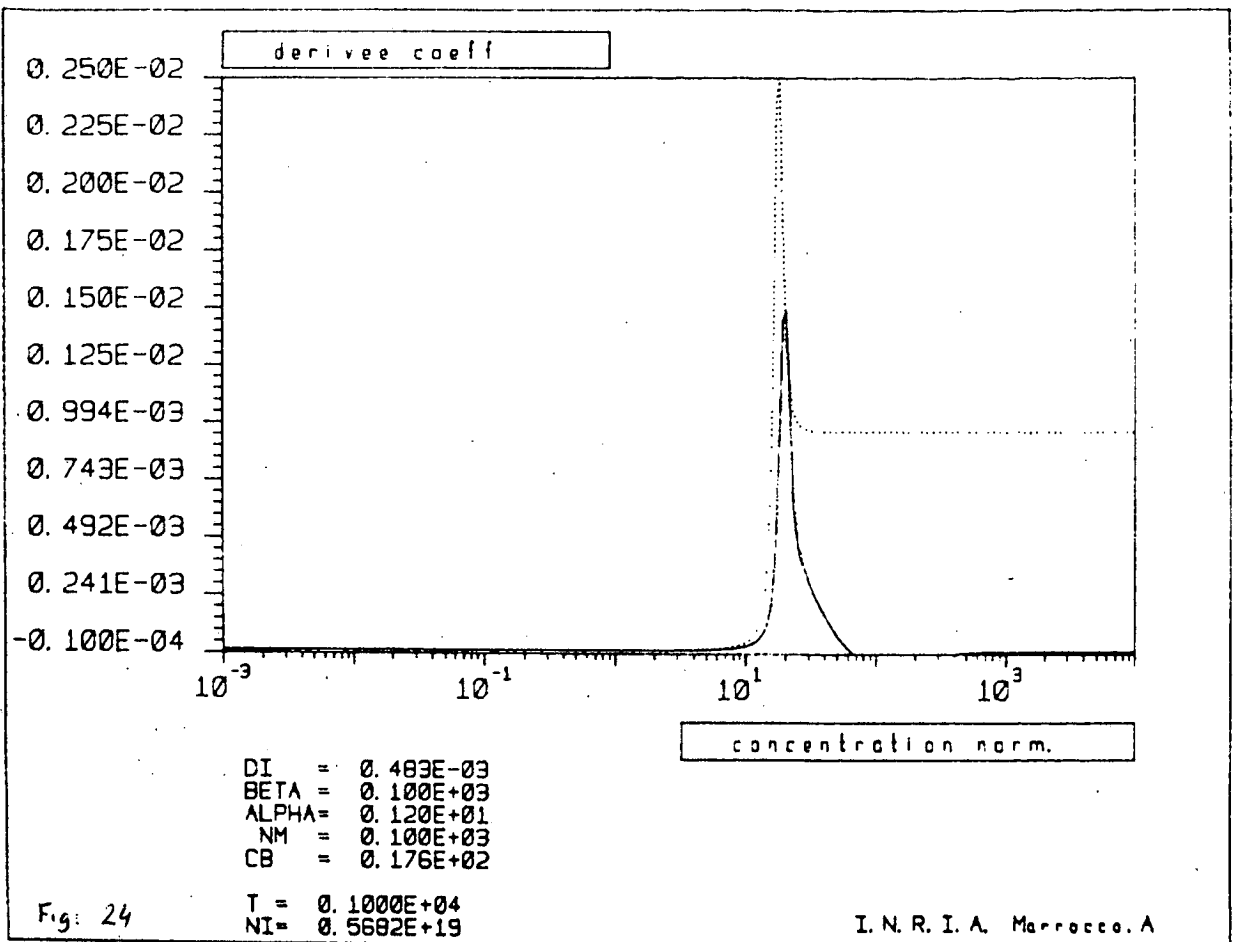


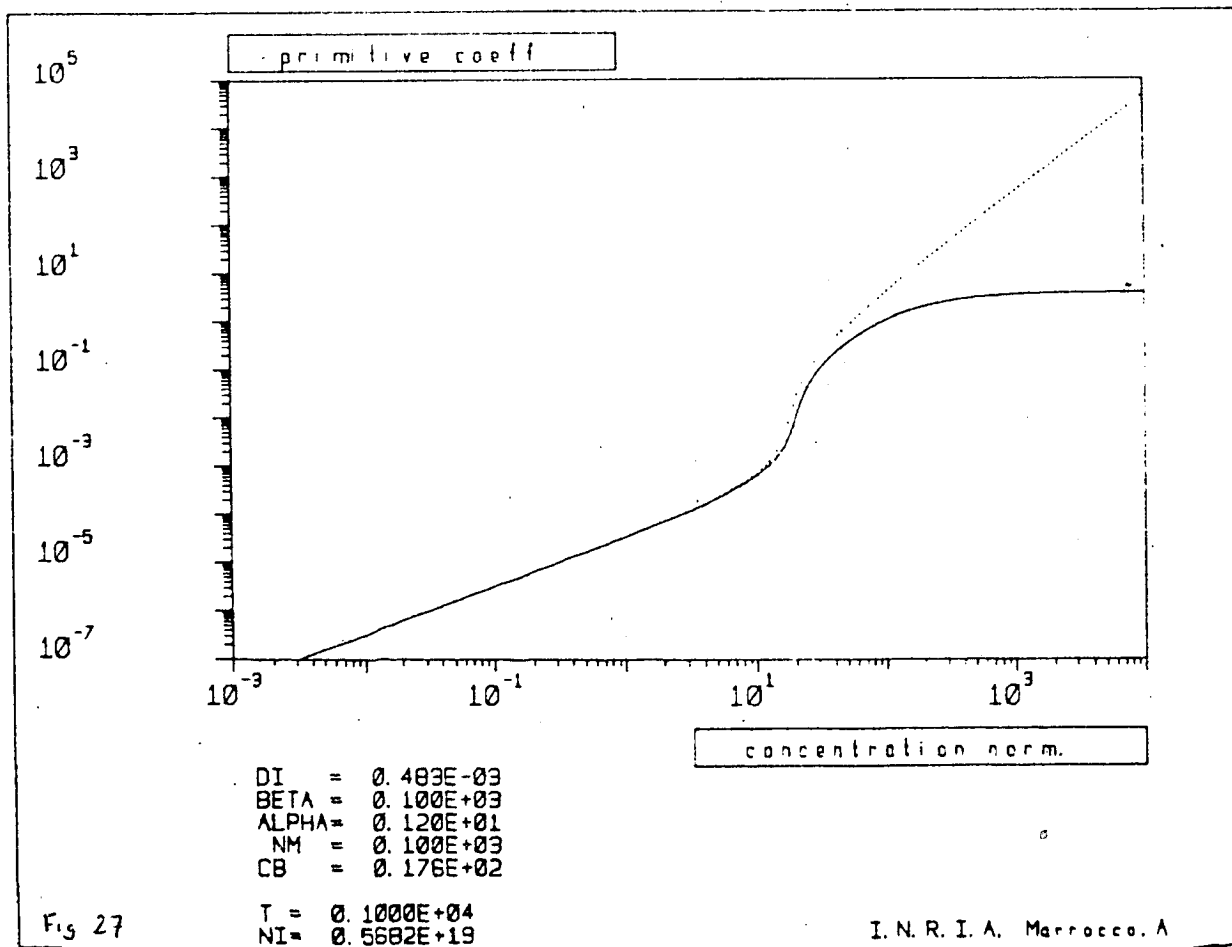
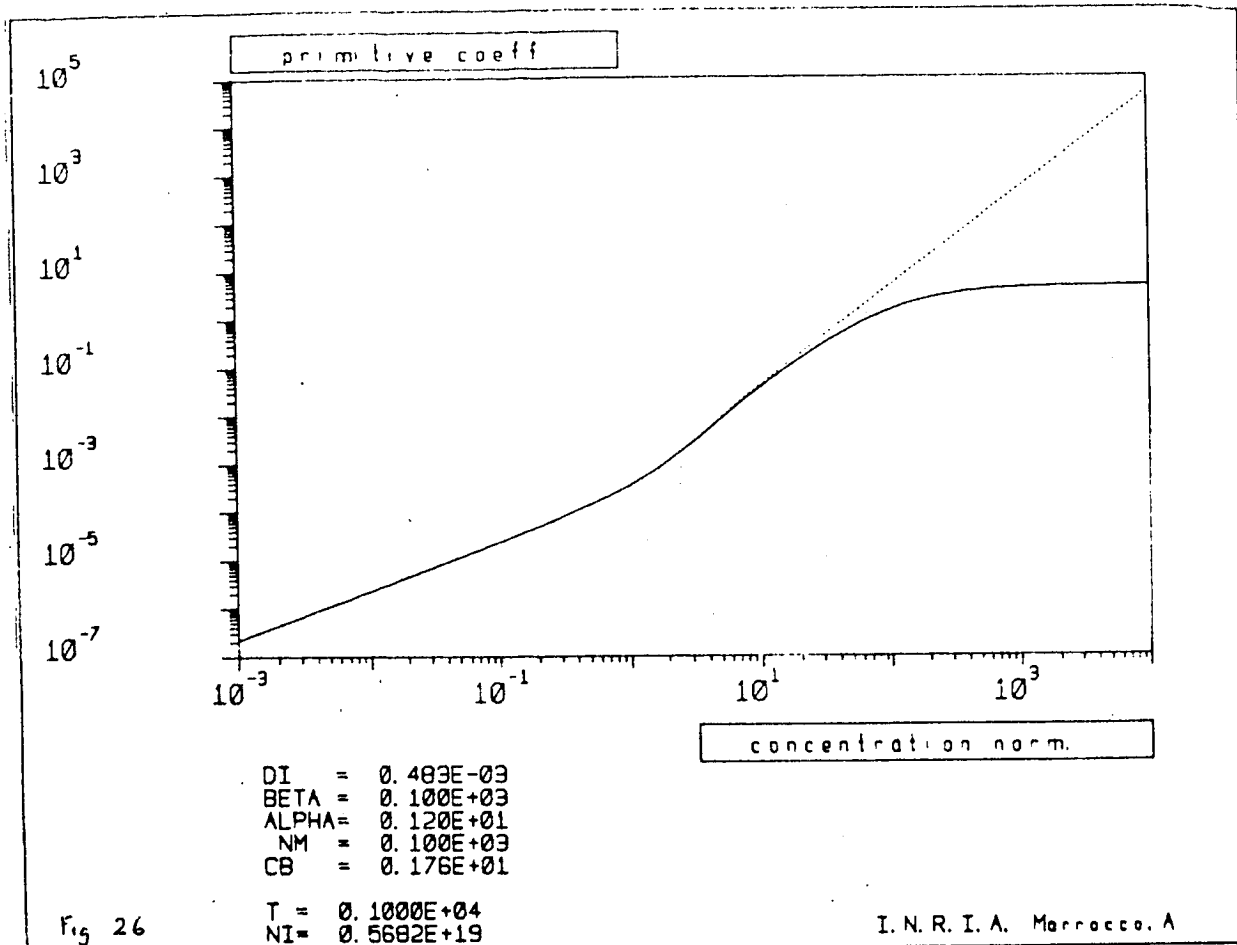


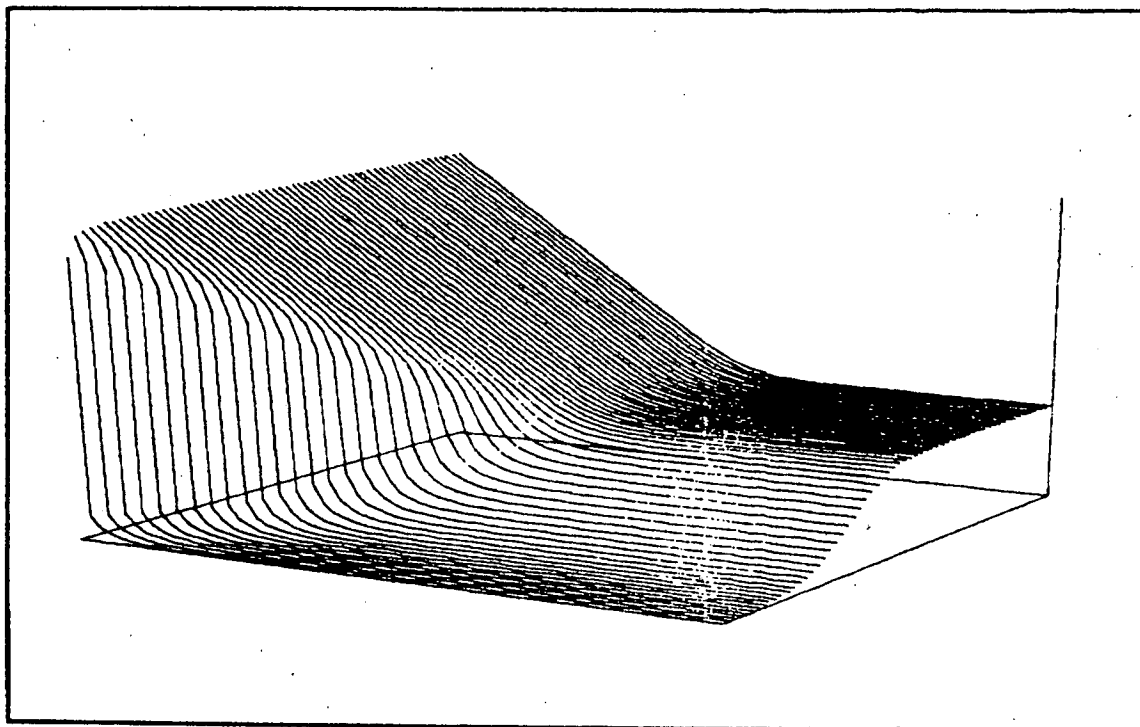






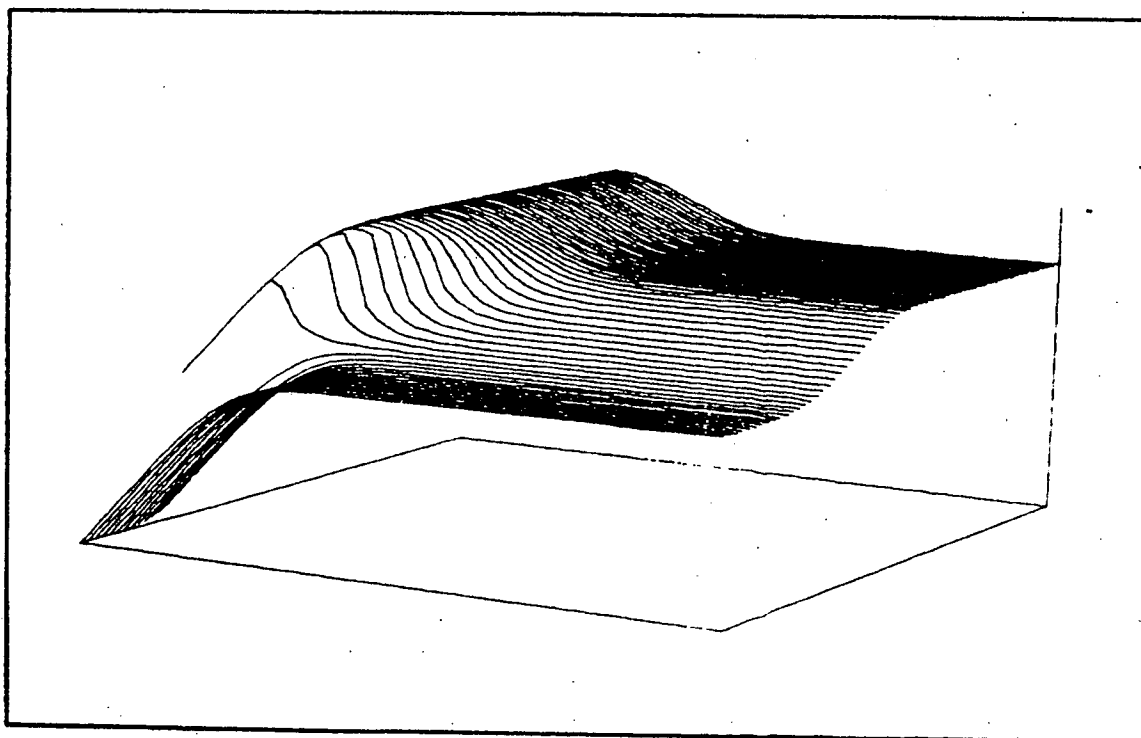






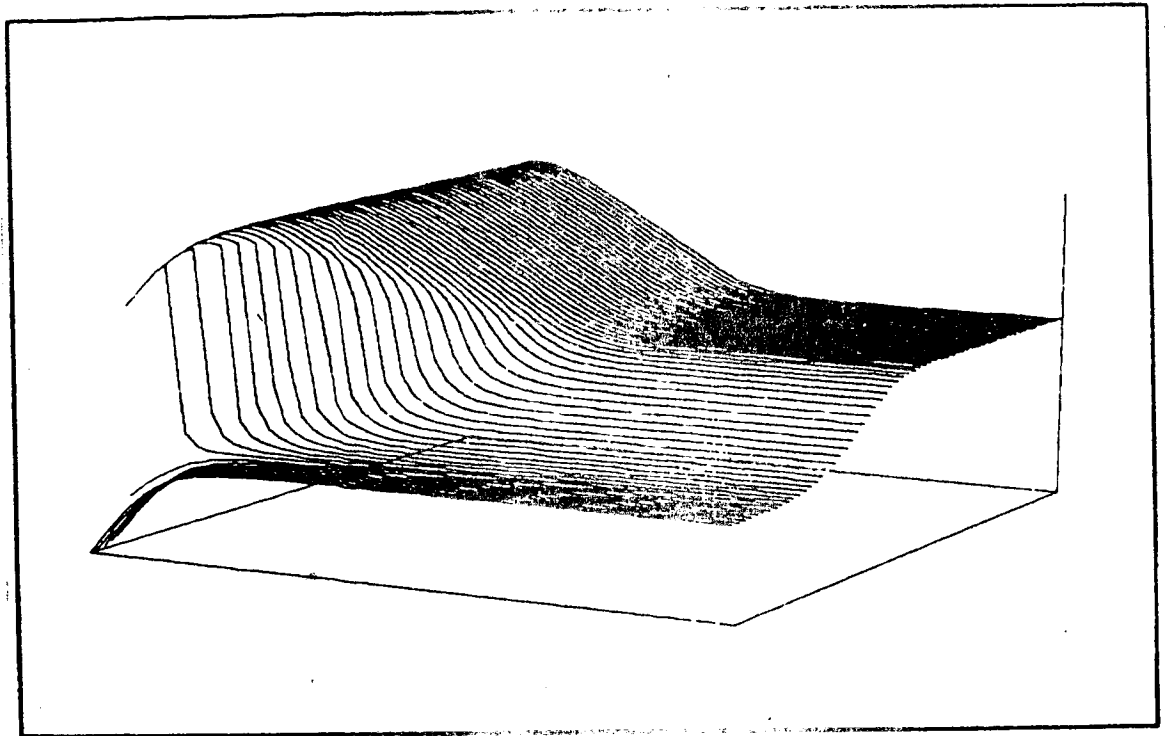
COEFF DIFFUS	DIA = .4829E-03	BORNES: X .100E+15 .100E+24	POS/°X = 120. DEG
T = 1000.	BETA =100.00	BORNES: Y .100E+15 .100E+24	ELEVATION= 15. DEG
NI= .568E+19		BORNES: Z .481E-05 .168E+02	1/2 ouvert 7. DEG
		LOG. LOG. LOG.	I. N. R. I. A. -Morocco

Fig: 28



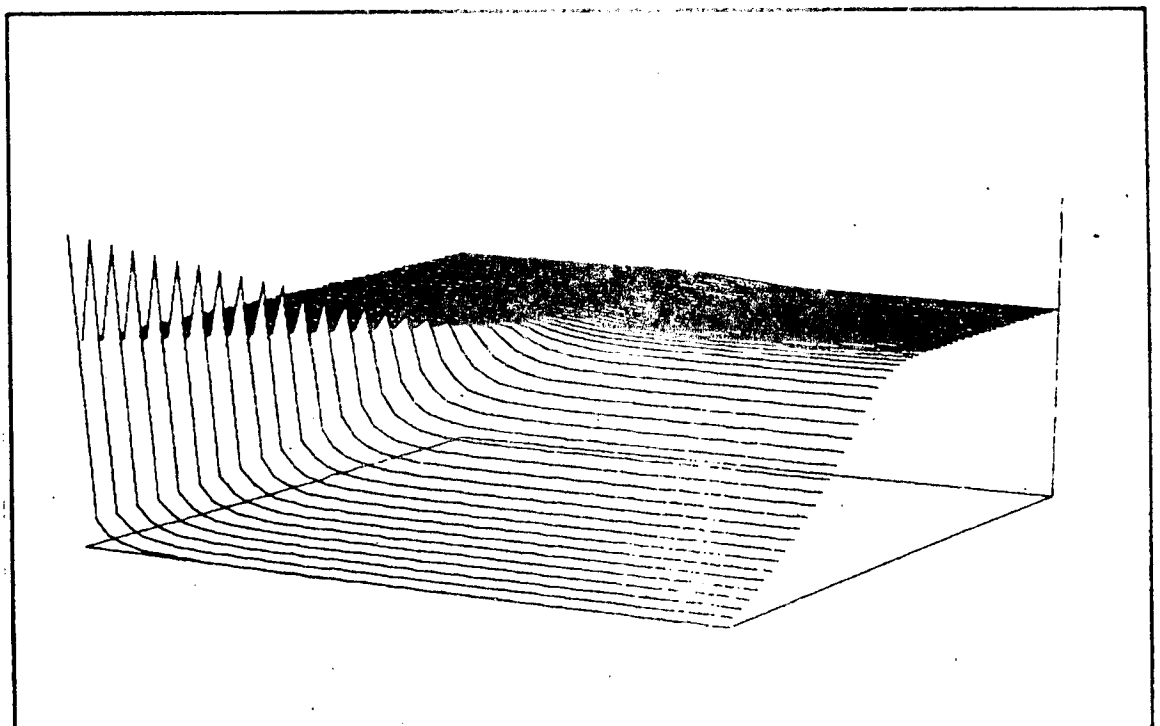
COEFF DIFFUS	DIA = .4829E-03	BORNES: X .100E+15 .100E+24	POS/°X = 120. DEG
T = 1000.	BETA =100.00	BORNES: Y .100E+15 .100E+24	ELEVATION= 15. DEG
NI= .568E+19	NM = .1000E+03	BORNES: Z .553E-10 .181E-01	1/2 ouvert 7. DEG
	ALPHA=1.20	LOG. LOG. LOG.	I. N. R. I. A. -Morocco

Fig 29



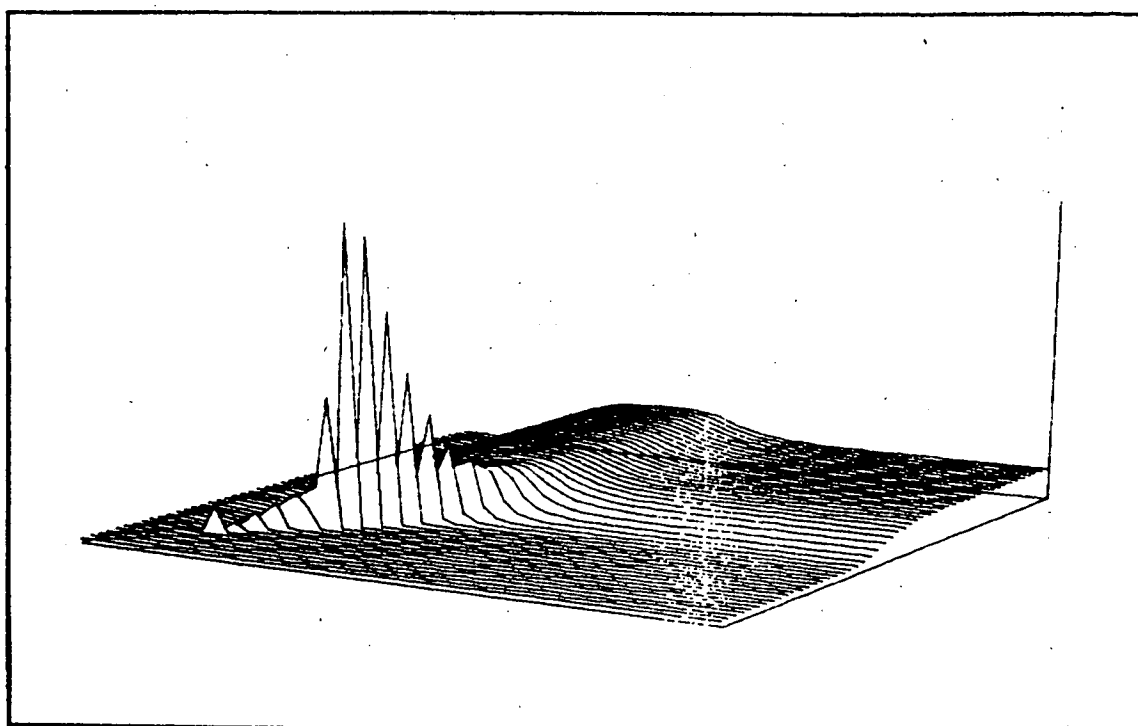
COEFF DIFFUS	DIA = .4829E-03	BORNES: X .100E+15 .100E+24	POS/°X = 120. DEG
	BETA =100.00	BORNES: Y .100E+15 .100E+24	ELEVATION= 15. DEG
T = 1000.		BORNES: Z .396E-07 .365E+00	1/2 ouvert 7. DEG
NI= .568E+19	NM =.2000E+04	LOG. LOG. LOG.	I. N. R. I. A. -Morocco
	ALPHA=1.20		

Fig 30



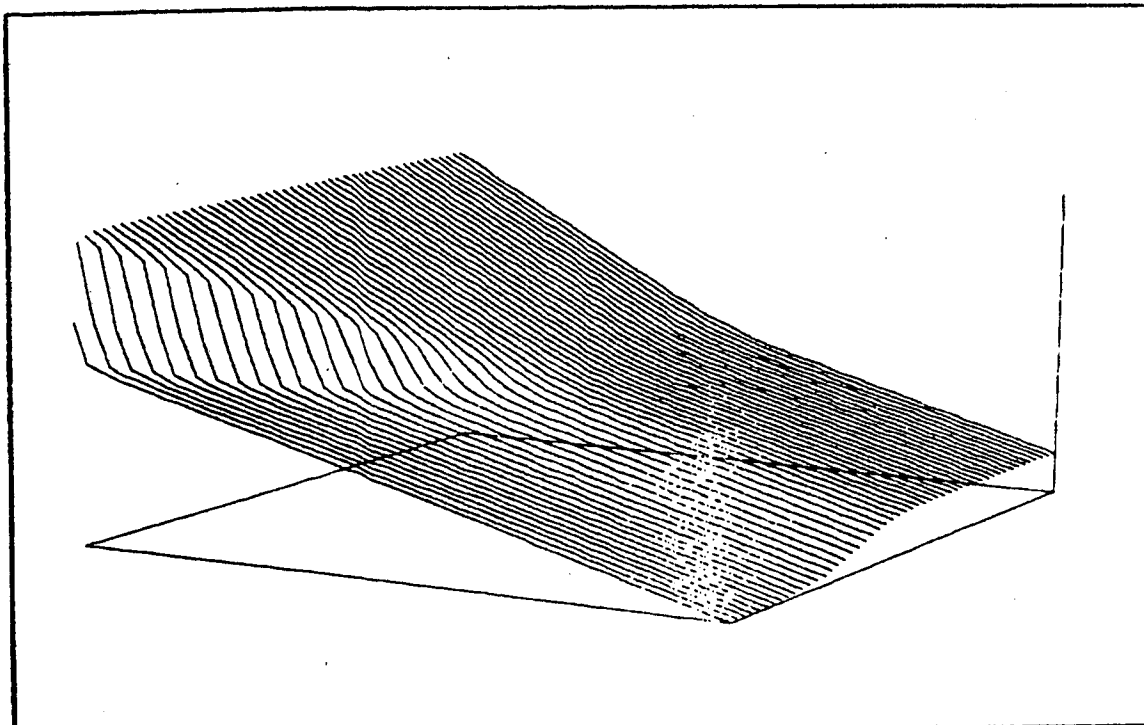
DERIVEE	DIA = .4829E-03	BORNES: X .100E+15 .100E+24	POS/°X = 120. DEG
	BETA =100.00	BORNES: Y .100E+15 .100E+24	ELEVATION= 15. DEG
T = 1000.		BORNES: Z .275E-08 .210E+01	1/2 ouvert 7. DEG
NI= .568E+19		LOG. LOG. LOG.	I. N. R. I. A. -Morocco

Fig 31



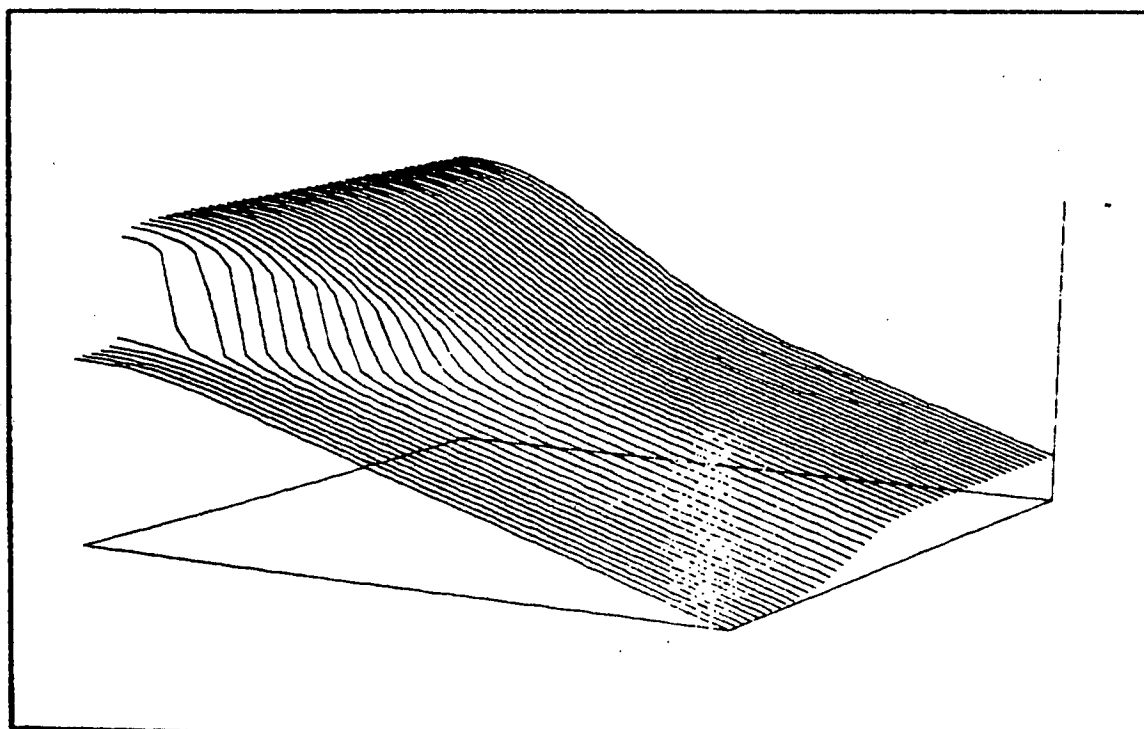
DERIVEE	DIA = .4829E-03	BORNES: X .100E+15 .100E+24	POS/°X = 120. DEG
T = 1000.	BETA =100.00	BORNES: Y .100E+15 .100E+24	ELEVATION= 15. DEG
NI= .568E+19	NM =.2000E+04	BORNES: Z -.098E-04.561E-02	1/2 ouvert 7. DEG
	ALPHA=1.20	LOG. LOG. LIN.	I. N. R. I. A. -Marocco

Fig 32



PRIMITIVE	DIA = .4829E-03	BORNES: X .100E+15 .100E+24	POS/°X = 120. DEG
T = 1000.	BETA =100.00	BORNES: Y .100E+15 .100E+24	ELEVATION= 15. DEG
NI= .568E+19		BORNES: Z .848E-10 .148E+06	1/2 ouvert 7. DEG
		LOG. LOG. LOG.	I. N. R. I. A. -Morocco

Fig 33



PRIMITIVE	DIA = .4829E-03	BORNES: X .100E+15 .100E+24	POS/°X = 120. DEG
T = 1000.	BETA =100.00	BORNES: Y .100E+15 .100E+24	ELEVATION= 15. DEG
NI= .568E+19	NM =.2000E+04	BORNES: Z .848E-10 .170E+04	1/2 ouvert 7. DEG
	ALPHA=1.20	LOG. LOG. LOG.	I. N. R. I. A. -Morocco

Fig 34

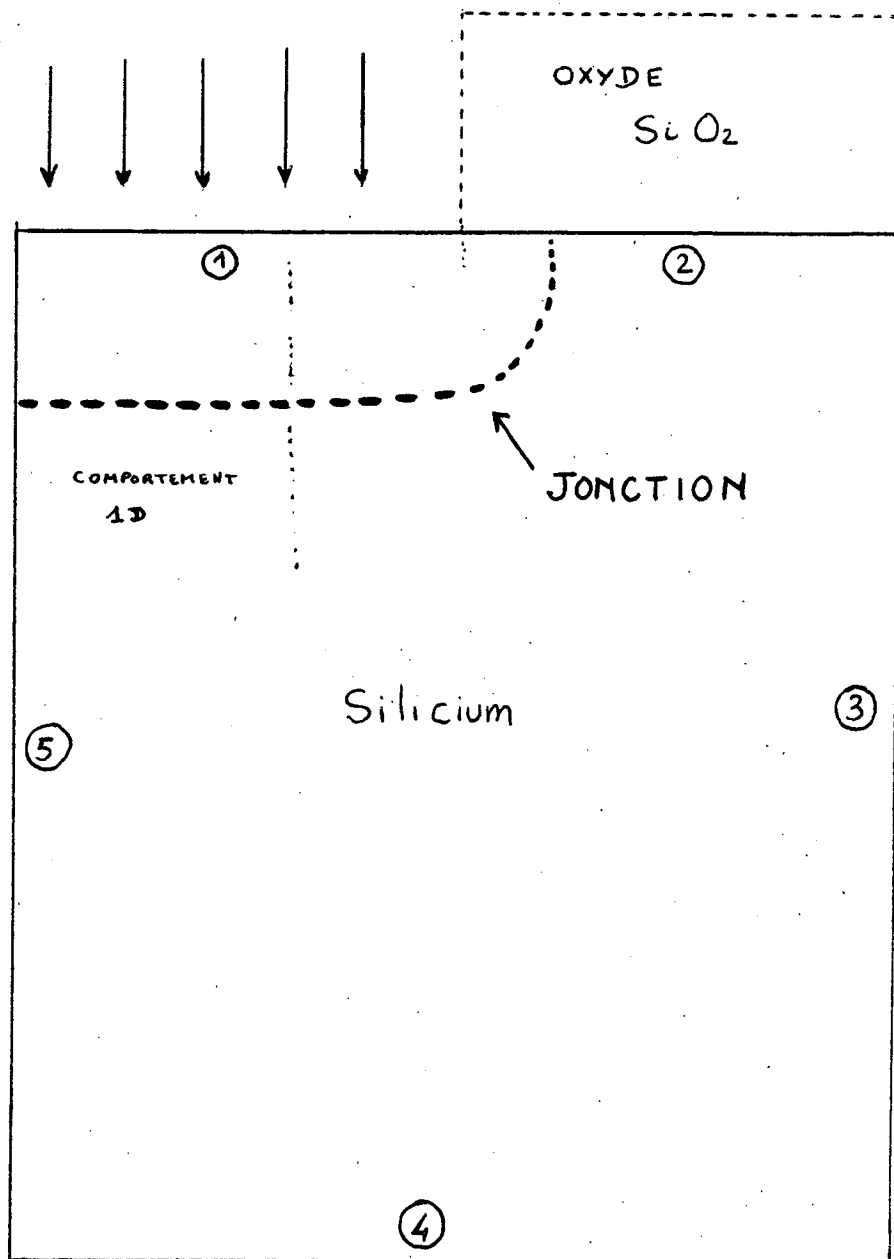


Fig: 35 Domaine de Simulation numérique

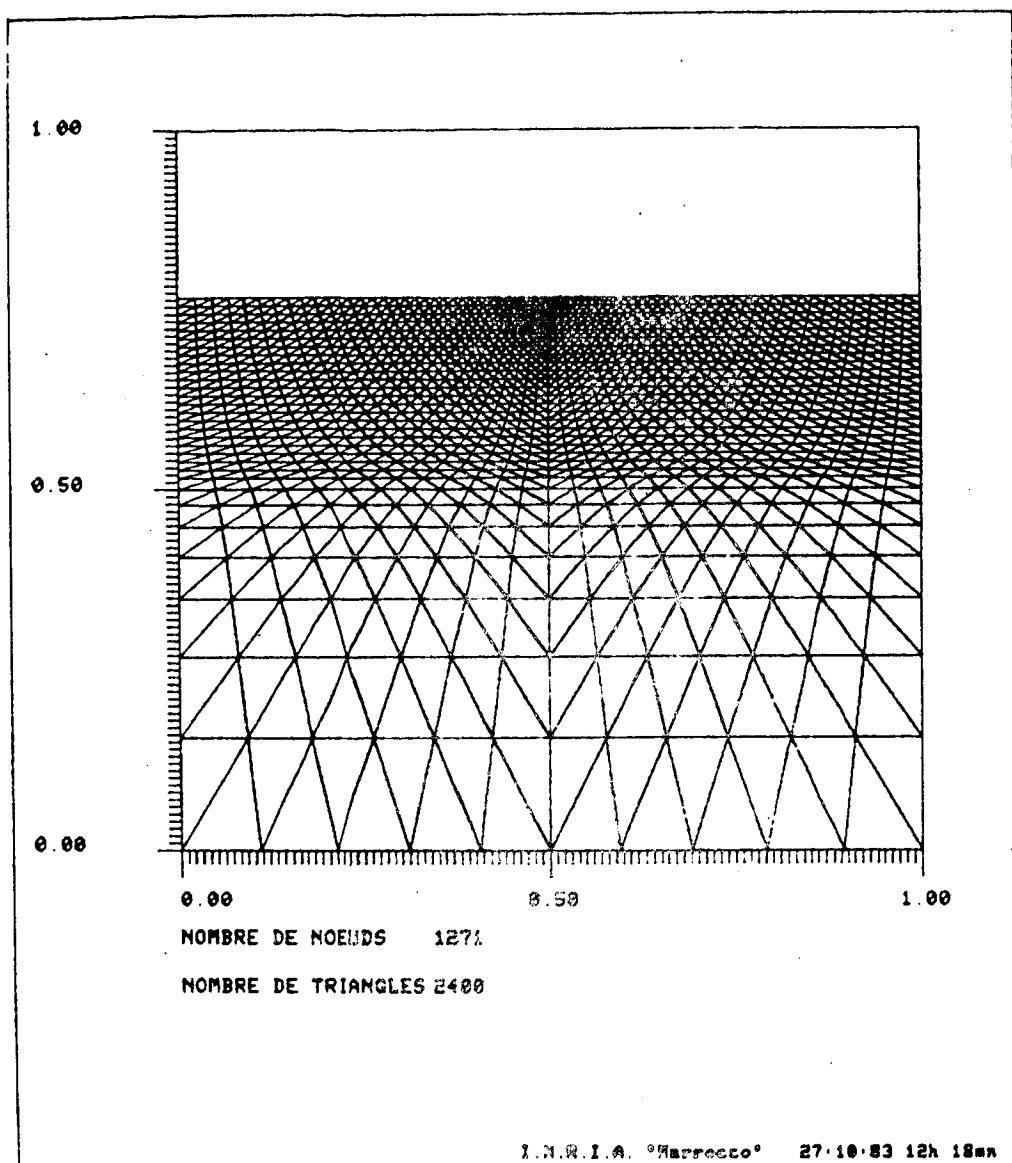
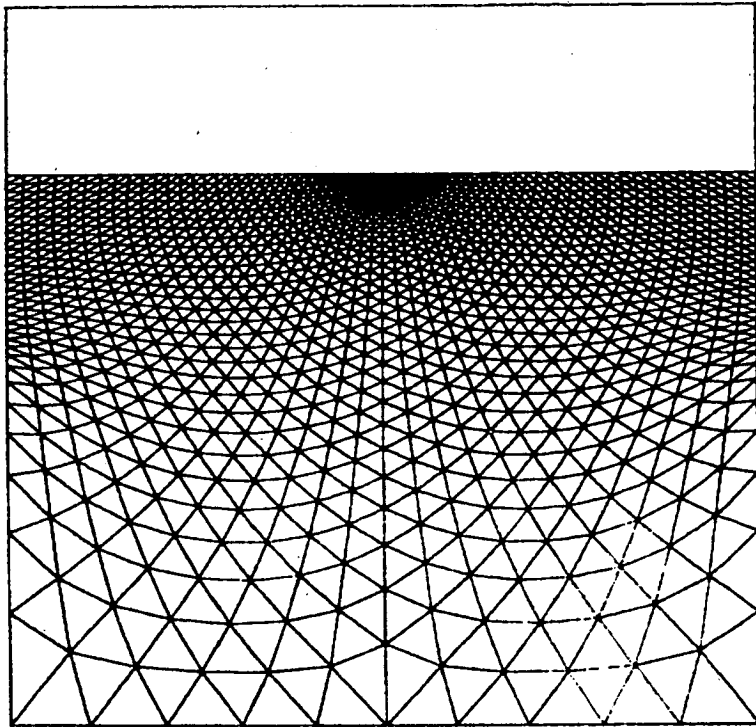


Fig: 36 Maillage du Silicium



NOMBRE DE NOEUDS 1271

NOMBRE DE TRIANGLES 2400

I.N.R.I.A. 'Marocco' 11-08-83 10h 30mn

Fig. 37 Regularisation d'un maillage

COMPARAISON SCHEMAS IMPLICITE ET GEAR
 DIFFUSION D'AL A 1000° DURANT 20 mn
 IMPLICITE GEAR

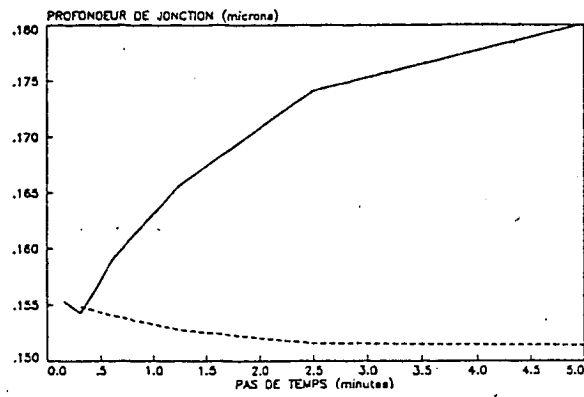


Figure 38

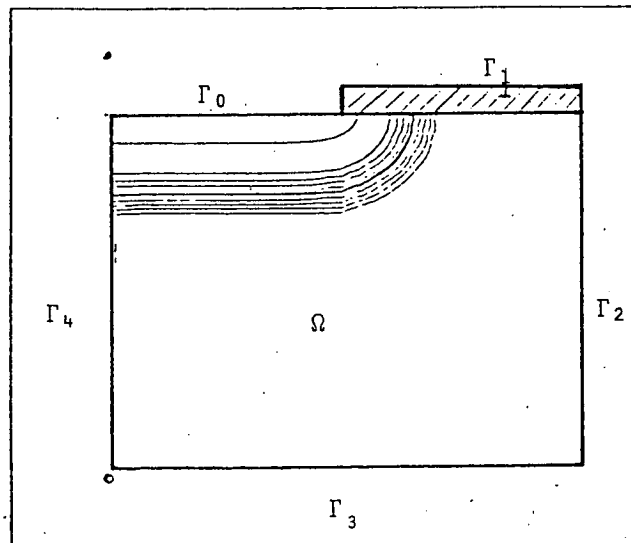


Figure 39 . Lignes isoconcentrations (10, 1, 0.1, 0.01, ...))
 En trait epais : Jonction

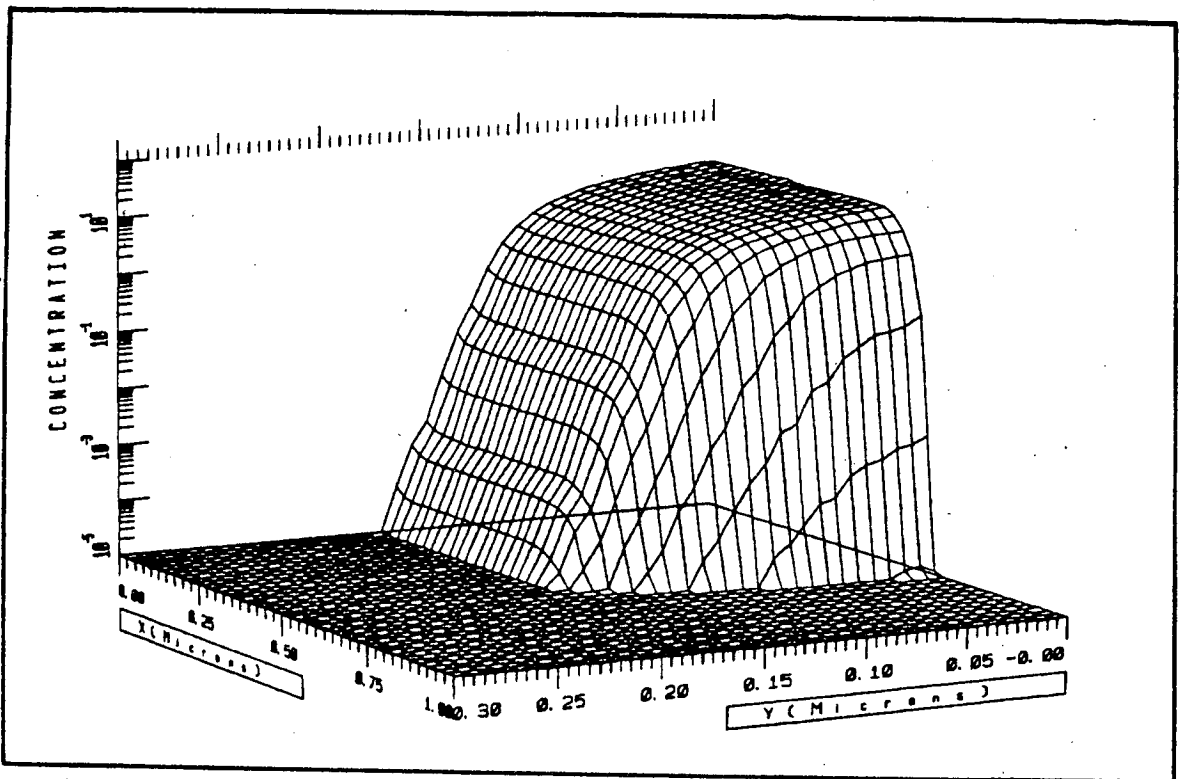


Fig:40 Diffusion d Arsenic dans du Silicium dope Boro
Temperature 1000 degres C Temps 20 minutes

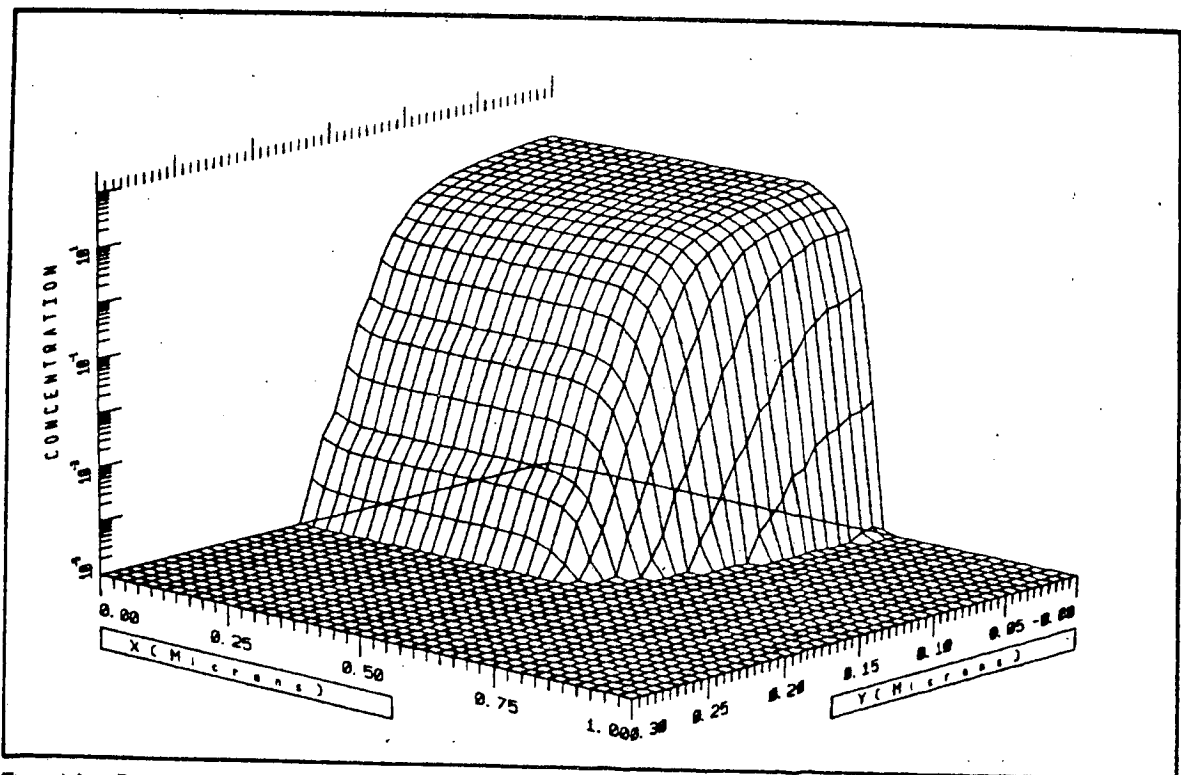


Fig:41 Diffusion d Arsenic dans du Silicium dope Boro
Temperature 1000 degres C Temps 20 minutes

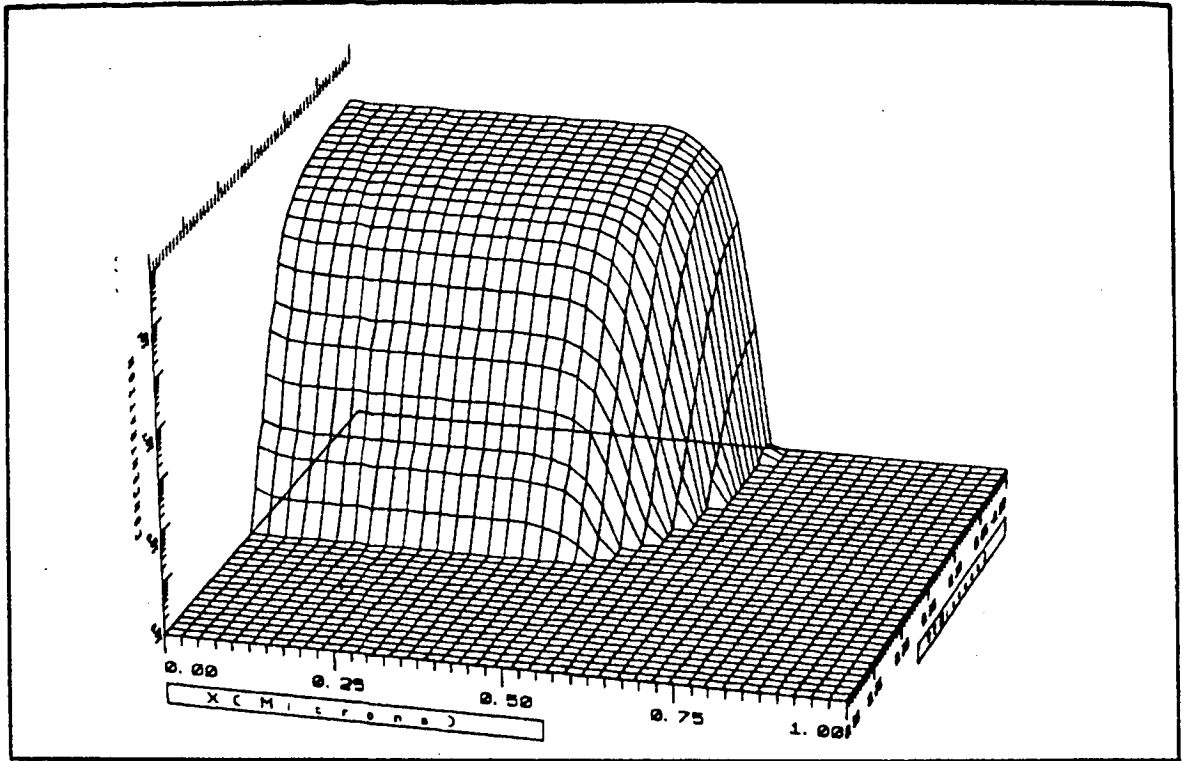


Fig: 42 Diffusion d'Arsenic dans du Silicium dope Bore
Temperature 1000 degres C Temps 20 minutes

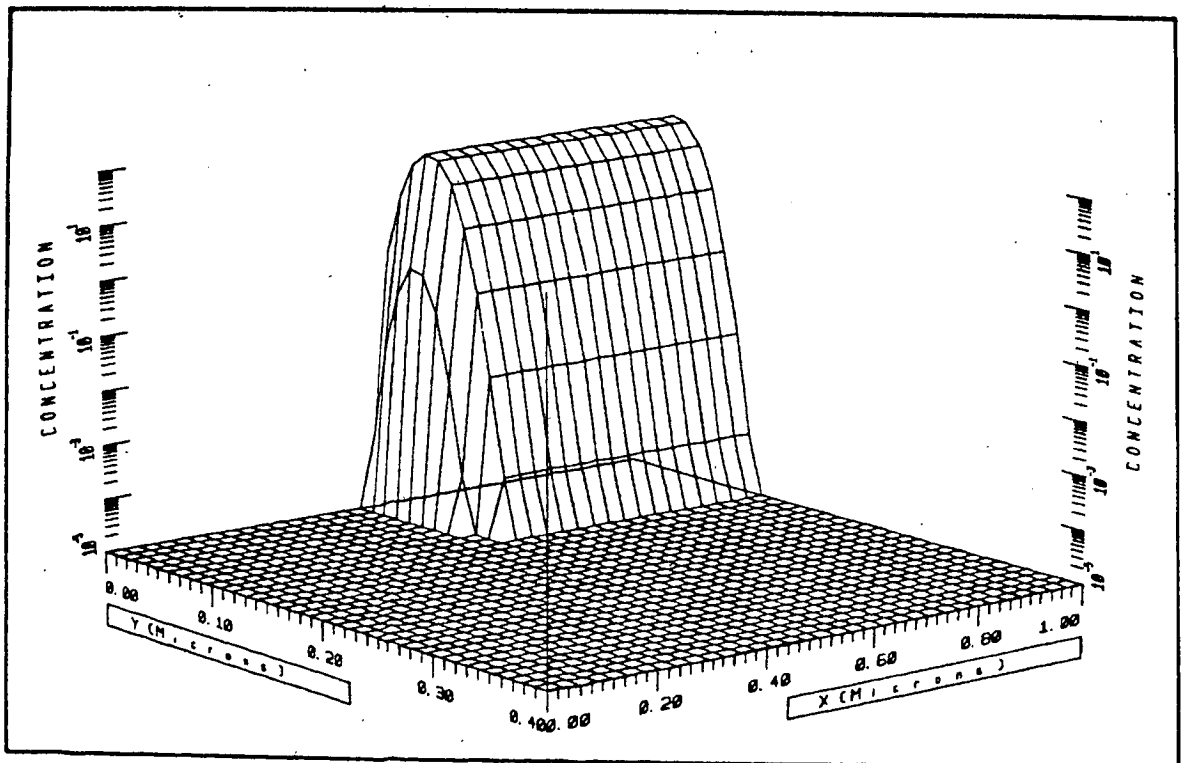


Fig: 43 IMPLANTATION IONIQUE

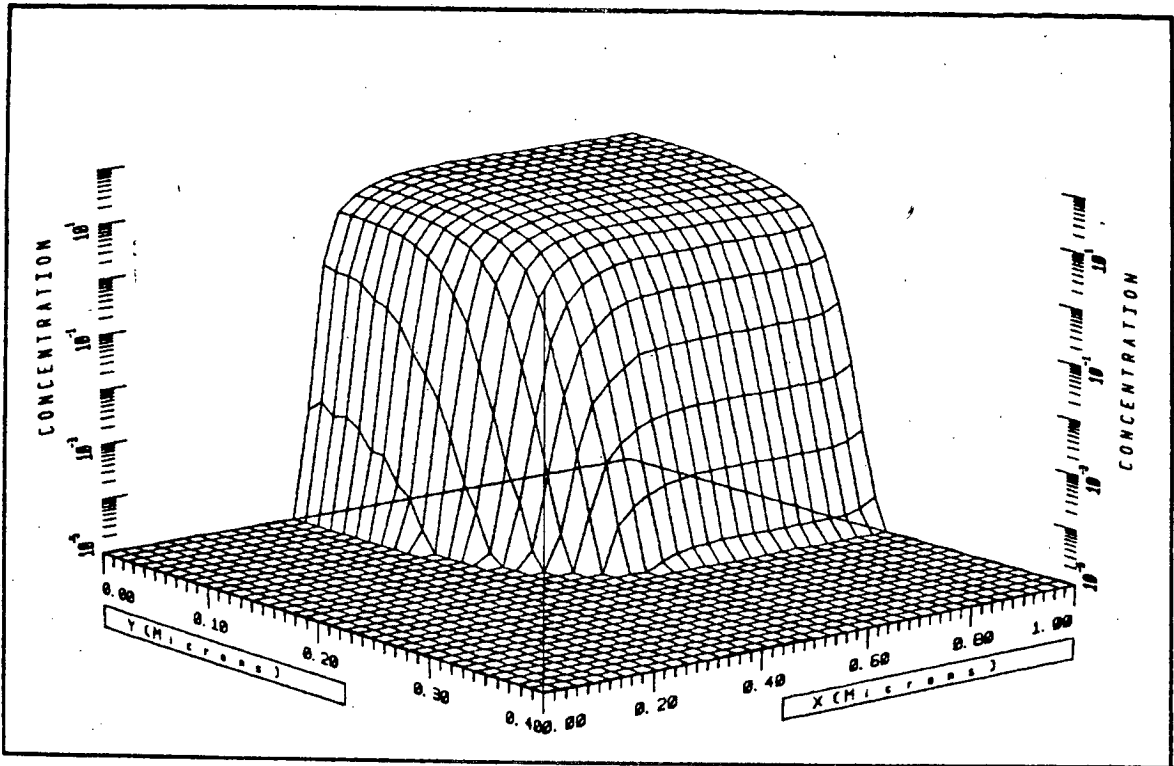


Fig:44 REDISTRIBUTION D ARSENIC APRES IMPLANTATION IONIQUE
 Temperature 1000 degrees C Temps 20 minutes

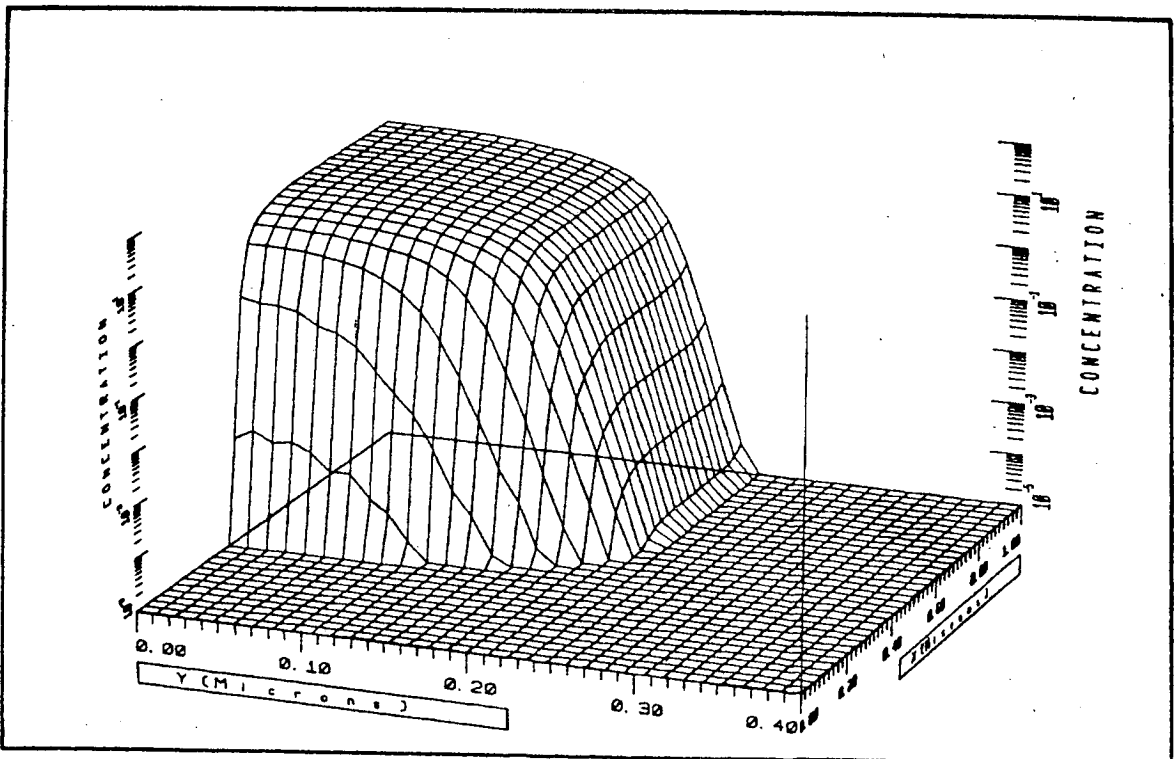


Fig:45 REDISTRIBUTION D ARSENIC APRES IMPLANTATION IONIQUE
 Temperature 1000 degrees C Temps 20 minutes

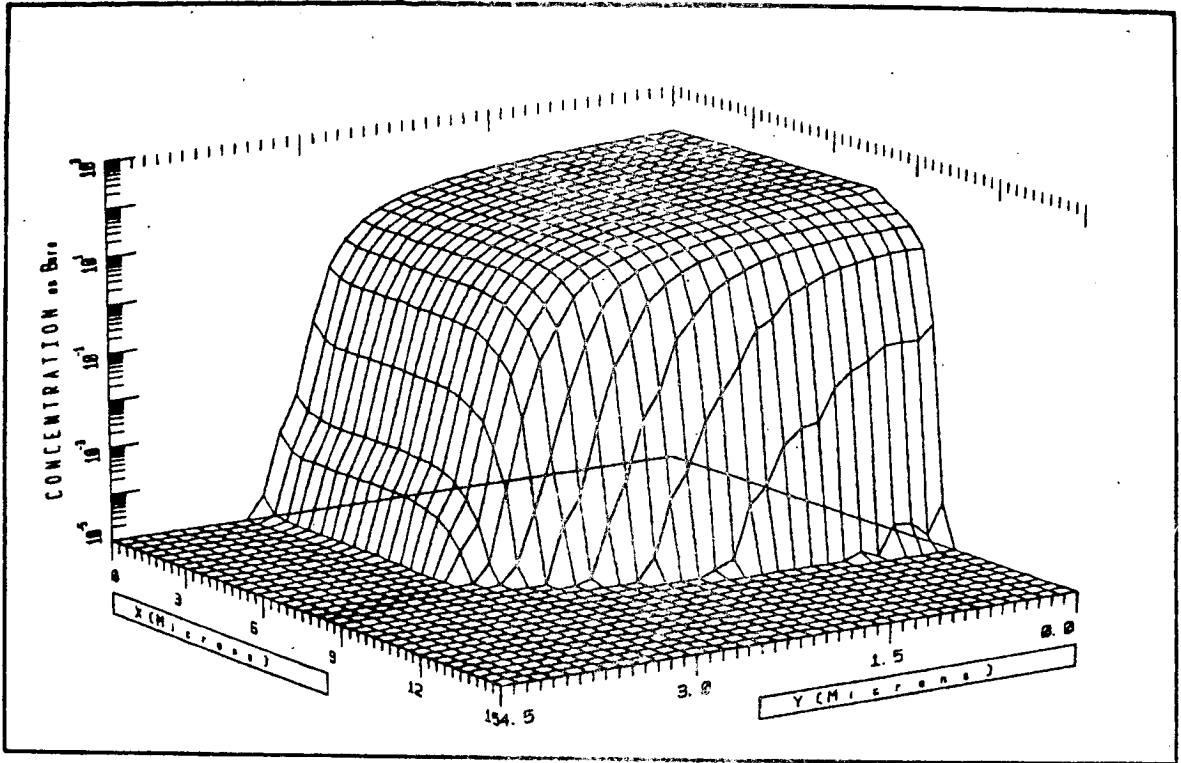
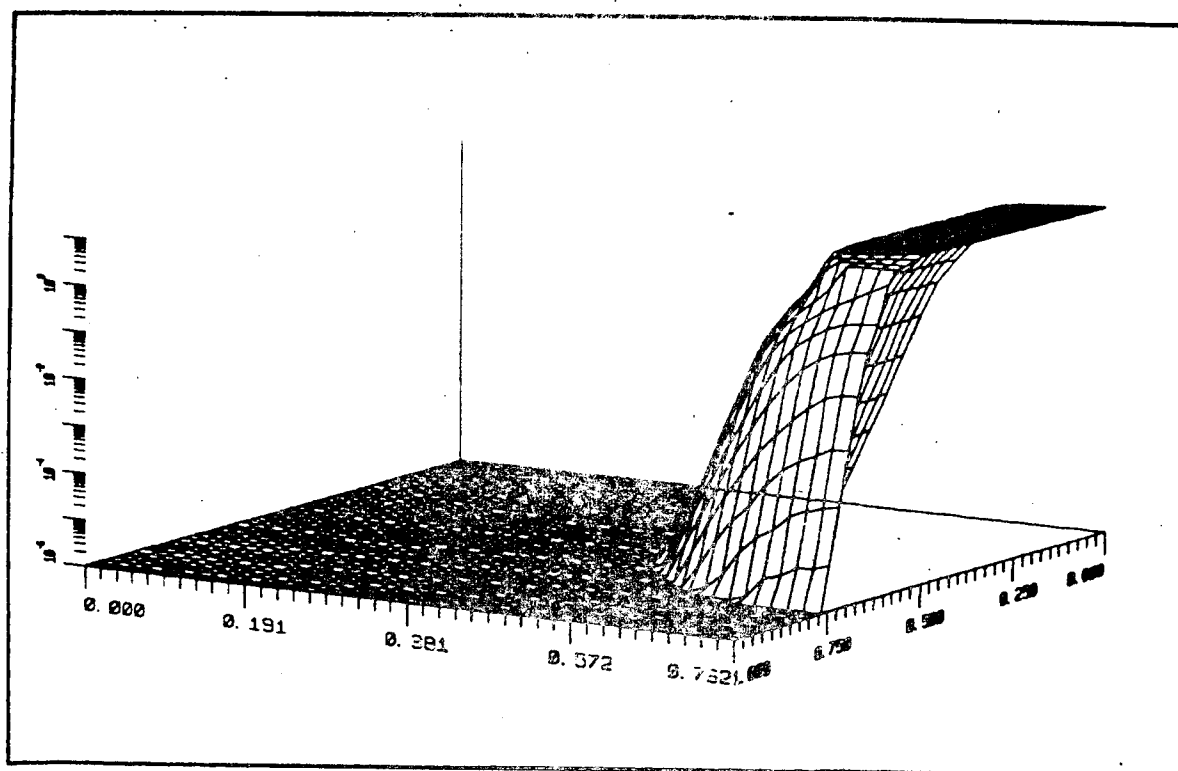
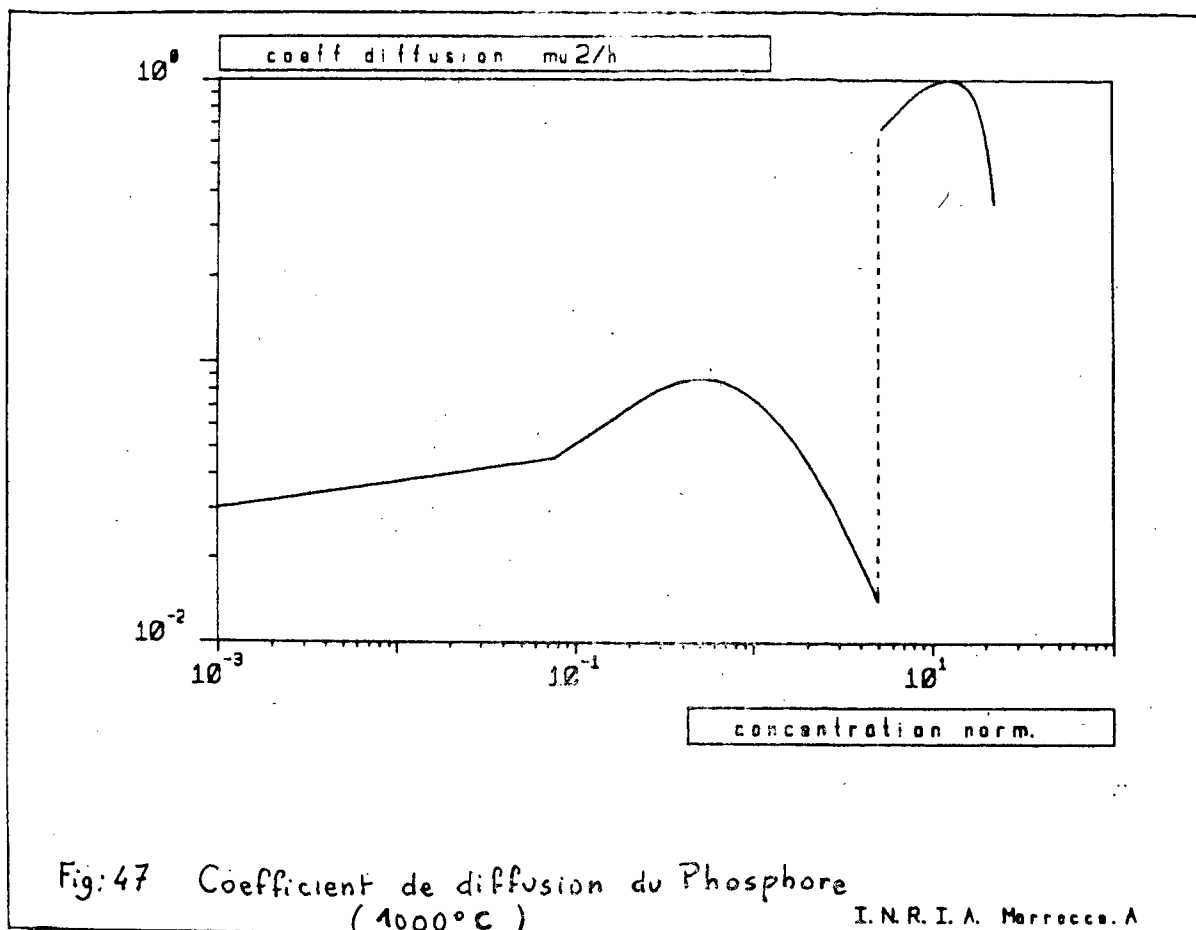


Fig. 46 Diffusion de Bore dans du silicium
Temperature 1100 degrees C. Temps 20 minutes



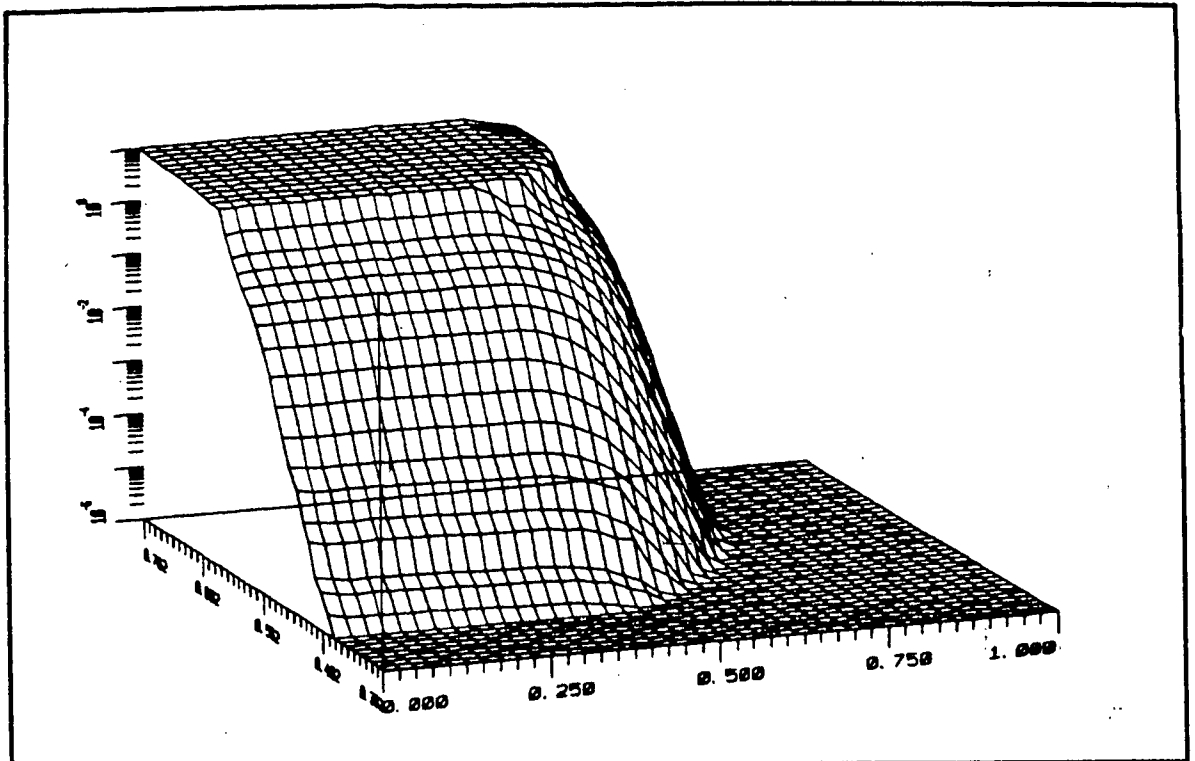


Fig 49 DIFFUSION DU PHOSPHORE
1000 Degres 5,6 minutes

(Dimensions à X 2)

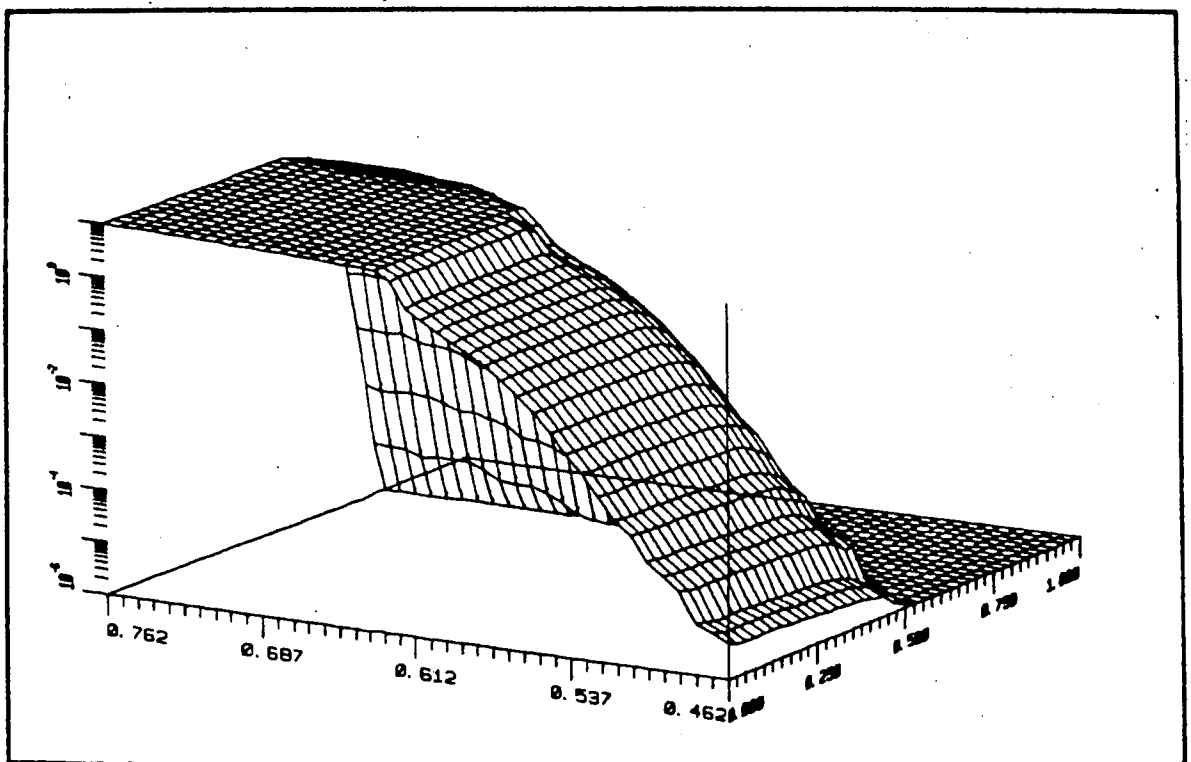


Fig 50 DIFFUSION DU PHOSPHORE
1000 Degres 5, minutes

(Dimensions à X 2)

concentration

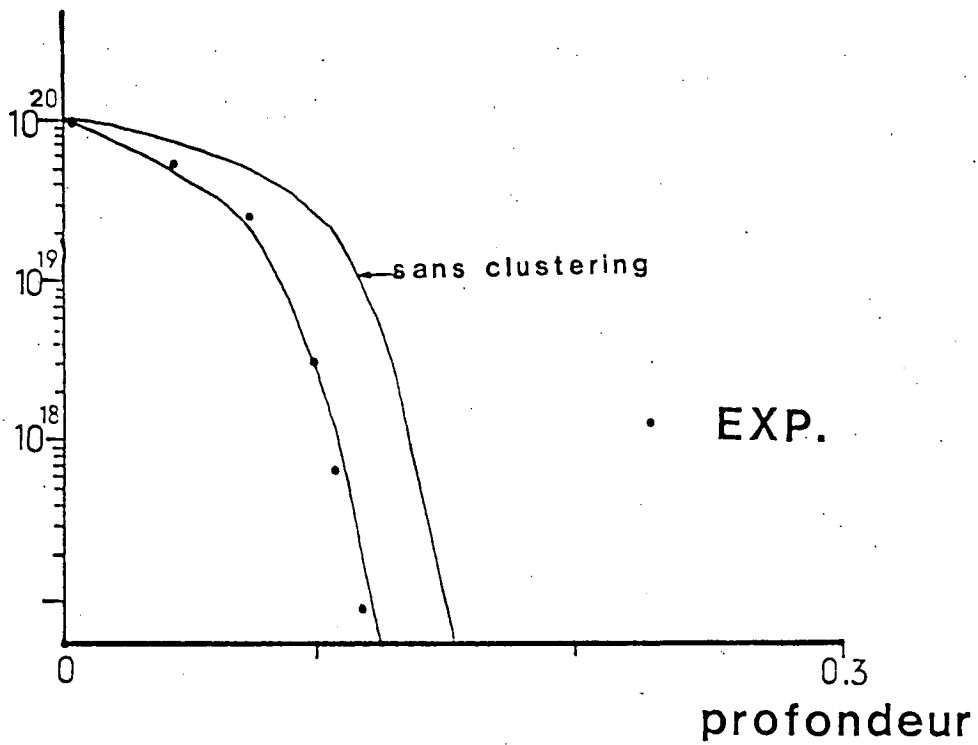


Fig 51 COUPE UNIDIMENSIONNELLE

II - DIFFUSION COUPLEE DE DEUX IMPURETES

Le modèle physique utilisé pour l'étude de la diffusion couplée de deux impuretés (qui seront l'Arsenic et le Bore) inclut l'effet du champ électrique interne, l'influence des lacunes sur la diffusion et le clustering dû aux très fortes concentrations d'Arsenic.

Ce modèle a été détaillé dans le paragraphe relatif à la diffusion d'une impureté (I-1.13).

Les différentes méthodes et algorithmes décrits ci-dessous se généralisent sans peine au cas de plusieurs impuretés diffusantes. Bien souvent nous ne détaillerons ici que le problème à deux impuretés (l'une positive et l'autre négative), déjà parce que cela est un problème intéressant en lui même et aussi pour ne pas alourdir les notations.

Nous reprendrons certains des problèmes types étudiés dans le paragraphe précédent et comparerons les résultats obtenus.

1. Formulation du problème - Equations

Si nous reprenons l'expression du flux (I,1.13) pour chacune des impuretés, et si nous écrivons les lois de conservation (I,1.3) nous obtenons (par exemple dans le cas où l'on ne considère pas explicitement le clustering) pour les concentrations normalisées

$$(1.1) \quad \frac{\partial C_A}{\partial t} = \nabla \cdot \left[D_{iA} \frac{1 + \beta_A N}{1 + \beta_A} \left\{ \left(1 + \frac{C_A}{\sqrt{(C_A - C_B)^2 + 4}} \right) \nabla C_A - \frac{C_A}{\sqrt{(C_A - C_B)^2 + 4}} \nabla C_B \right\} \right]$$

$$(1.2) \quad \frac{\partial C_B}{\partial t} = \nabla \cdot \left[D_{iB} \frac{1 + \beta_B (N)}{1 + \beta_B} \left\{ \left(1 + \frac{C_B}{\sqrt{(C_A - C_B)^2 + 4}} \right) \nabla C_B - \frac{C_B}{\sqrt{(C_A - C_B)^2 + 4}} \nabla C_A \right\} \right]$$

A ces équations (1.1) et (1.2) il faudra bien entendu ajouter les conditions aux limites et les conditions initiales pour chacune des impuretés.

Rappelons que C_A représente la concentration normalisée alors en Arsenic et C_B celle du Bore ; N est alors donné par

$$(1.3) \quad N = \frac{1}{2} \left(C_A - C_B + \sqrt{(C_A - C_B)^2 + 4} \right)$$

Ainsi si m est le nombre d'impuretés diffusantes, on obtient un système de m équations non linéaires couplées, le couplage se faisant par la valeur des concentrations ainsi que par le gradient de ces mêmes concentrations.

Suivant ce qui a déjà été fait dans le paragraphe précédent dans le cas où l'on ne considèrerait qu'une seule impureté diffusante, nous allons formuler le problème sous une forme plus adaptée au traitement numérique par éléments finis.

2 - Approximation numérique - Formulation variationnelle

Rappelons ici la forme générale que prenait l'équation de diffusion d'une impureté, donnée sous forme variationnelle et après discrétisation en temps suivant le schéma IMPLICITE ou le schéma de GEAR.

$$(2.1) \left\{ \begin{array}{l} \text{trouver } c \in \mathcal{V} \text{ tel que} \\ \int_{\Omega} C \cdot \varphi \, dx + \mu \int_{\Omega} D(c) \nabla C \cdot \nabla \varphi \, dx = \int_{\Omega} f \cdot \varphi \, dx \quad \forall \varphi \in \mathcal{V}_0 \end{array} \right.$$

avec \mathcal{V} et \mathcal{V}_0 espaces fonctionnels dépendant des conditions aux limites, μ et f dépendant du schéma de discrétisation en temps choisi.

Une telle formulation (2.1) se généralise au cas de m impuretés ; pour cela introduisons les notations suivantes :

$$(2.2) \quad \begin{aligned} \vec{C} &= (C_1, C_2, \dots, C_m) \in \prod_i \mathcal{V}_i = \mathcal{V} \\ \vec{\varphi} &= (\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_m) \in \prod_i \mathcal{V}_{i0} = \mathcal{V}_0 \end{aligned}$$

Alors le problème de la diffusion couplée de m impuretés pourra s'écrire,

$$(2.3) \left\{ \begin{array}{l} \text{trouver } \vec{C} \in \mathcal{V} \text{ tel que} \\ \int_{\Omega} \vec{C} \cdot \vec{\varphi} \, dx + \mu \int_{\Omega} [D(\vec{C}) \nabla \vec{C}] \cdot \nabla \vec{\varphi} \, dx = \int_{\Omega} \vec{f} \cdot \vec{\varphi} \, dx \quad \forall \vec{\varphi} \in \mathcal{V}_0 \end{array} \right.$$

Dans (2.3) $D(\vec{C})$ est un opérateur de dimension m agissant sur le "vecteur"

$$(2.4) \quad \nabla \vec{C} = \begin{pmatrix} \nabla C_1 \\ \nabla C_2 \\ \vdots \\ \nabla C_m \end{pmatrix}$$

On retrouve les m équations en faisant successivement dans (2.3)

$$a) \quad \vec{\varphi} = (\varphi_1, 0, 0, \dots, 0)$$

$$b) \quad \vec{\varphi} = (0, \varphi_2, 0, \dots, 0)$$

\vdots

etc

Pour le cas qui nous intéresse (diffusion de 2 impuretés), $D(\vec{C})$ peut être représenté par une "matrice" à 2 lignes et deux colonnes dont les éléments dépendent de C_1 et C_2

$$(2.5) \quad D(\vec{C}) = \begin{bmatrix} D_{11}(C_1, C_2) & D_{12}(C_1, C_2) \\ D_{21}(C_1, C_2) & D_{22}(C_1, C_2) \end{bmatrix}$$

$$\vec{C} = \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_A \\ C_B \end{pmatrix}$$

Utilisant (1.1) et (1.2), on trouve pour les différents termes D_{ij}

$$(2.6) \quad \begin{cases} D_{11}(C_A, C_B) = D_{iA} \frac{1 + \beta_A N}{1 + \beta_A} \left(1 + \frac{C_A}{\sqrt{(C_A - C_B)^2 + 4}} \right) \\ D_{12}(C_A, C_B) = - D_{iA} \frac{1 + \beta_A N}{1 + \beta_A} \left(\frac{C_A}{\sqrt{(C_A - C_B)^2 + 4}} \right) \\ D_{21}(C_A, C_B) = - D_{iB} \frac{1 + \beta_B (1/N)}{1 + \beta_B} \left(\frac{C_B}{\sqrt{(C_A - C_B)^2 + 4}} \right) \\ D_{22}(C_A, C_B) = D_{iB} \frac{1 + \beta_B (1/N)}{1 + \beta_B} \left(1 + \frac{C_B}{\sqrt{(C_A - C_B)^2 + 4}} \right) \end{cases}$$

L'opérateur D a donc la structure suivante

$$\begin{bmatrix} K_A (1 + \alpha) & -K_A \alpha \\ -K_B \beta & K_B (1 + \beta) \end{bmatrix}$$

avec $K_A, K_B > 0$ et $\alpha, \beta \geq 0$

donc $\det D = K_A K_B (1 + 2(\alpha + \beta)) > 0$

quelles que soient les concentrations C_A et C_B . Ce résultat garanti l'ellipticité du problème (à chaque pas de temps).

Du point de vue approximation numérique, nous prendrons pour chaque impureté, une approximation de type de celle donnée dans le paragraphe précédent.

Nous allons maintenant détailler différents algorithmes permettant de résoudre numériquement les problèmes discrets analogues à (2.3). Comme dans le paragraphe précédent nous omettrons souvent l'indice h référant au problème discret.

3 - Algorithmes de résolution

Il est tout à fait naturel d'essayer d'utiliser au maximum les algorithmes et les logiciels développés pour la diffusion d'une impureté. Aussi un premier algorithme auquel on peut songer peut être le suivant :

On effectue un pas de diffusion d'Arsenic, c'est à dire calcul de C_A^n à partir de C_A^{n-1} (en supposant la distribution en bore connue) puis un pas de diffusion de bore (en actualisant les différents coefficients avec la nouvelle concentration

d'Arsenic calculée). Un tel processus ne nécessite que des logiciels de diffusion d'une impureté (et n'importe lequel des algorithmes décrits dans le paragraphe I peut faire l'affaire).

Malheureusement un tel procédé trop simpliste ne donne pas des résultats satisfaisants ; on a en quelque sorte trop découplé les équations ; les résultats sur les concentrations d'impureté diffèrent selon que l'on considère d'abord la diffusion d'Arsenic puis celle du bore ou inversement, d'abord celle du bore puis celle de l'Arsenic.

Nous allons essayer de généraliser les différents algorithmes détaillés dans le paragraphe précédent (du moins les plus significatifs), et nous indiquerons de même comment on peut retrouver le processus que l'on vient d'exposer.

3.1 - Linéarisation - Point fixe

Si on transcrit le schéma donné en (I-3.1) on obtient

$$(3.1) \left\{ \begin{array}{l} \int_{\Omega} \vec{C}^n \cdot \vec{\varphi} \, dx + \mu \int_{\Omega} [D(\vec{C}^{n-1}) \nabla \vec{C}^n] \cdot \nabla \varphi \, dx = \int_{\Omega} \vec{f} \cdot \vec{\varphi} \, dx \quad \forall \vec{\varphi} \in \mathcal{V} \\ \vec{C}^n \in \mathcal{V} \end{array} \right.$$

soit, si nous explicitons, C_1^{n-1}, C_2^{n-1} connus, on calcule C_1^n et C_2^n solutions de

$$(3.2) \int_{\Omega} C_1^n \cdot \varphi_1 \, dx + \mu \int_{\Omega} D_{11}(C_1^{n-1}, C_2^{n-1}) \nabla C_1^n \cdot \nabla \varphi_1 \, dx + \mu \int_{\Omega} D_{12}(C_1^{n-1}, C_2^{n-1}) \nabla C_2^n \cdot \nabla \varphi_1 \, dx = \int_{\Omega} f_1 \cdot \varphi_1 \, dx \quad \forall \varphi_1 \in \mathcal{V}_1$$

$$(3.3) \int_{\Omega} C_2^n \cdot \varphi_2 \, dx + \mu \int_{\Omega} D_{21}(C_1^{n-1}, C_2^{n-1}) \nabla C_1^n \cdot \nabla \varphi_2 \, dx + \mu \int_{\Omega} D_{22}(C_1^{n-1}, C_2^{n-1}) \nabla C_2^n \cdot \nabla \varphi_2 \, dx = \int_{\Omega} f_2 \cdot \varphi_2 \, dx \quad \forall \varphi_2 \in \mathcal{V}_2$$

Même avec ce schéma, qui comme nous l'avons vu dans le paragraphe I ne donne que des résultats corrects que lorsque le pas de temps est suffisamment petit, les deux équations (3.2) et (3.3) sont couplées : terme ∇C_2^n dans (3.2) et ∇C_1^n dans (3.3).

Le processus que nous avons décrit précédemment dans l'introduction revient à remplacer ∇C_2^n dans (3.2) par ∇C_2^{n-1} . Ce faisant, il n'est pas étonnant que les résultats d'un tel schéma soient peu satisfaisants.

Pour obtenir la convergence d'un tel schéma il faut bien évidemment "boucler" à l'intérieur du pas de temps lui-même ; là, différentes variantes sont possibles.

Tout d'abord, les algorithmes exposés au paragraphe I, se généralisent au cas vectoriel, c'est à dire au cas ou l'on considère en chaque noeud de la triangulation, non pas la concentration d'une impureté, mais un vecteur concentration

$$\vec{C}_i = (C_1^i, C_2^i, \dots, C_m^i).$$

Ainsi si w_i est la fonction de base associée au noeud i de la triangulation, on peut réécrire (3.2) et (3.3) de la façon suivante

C_1^{n-1} et C_2^{n-1} étant donnés, calculer C_1^n et C_2^n solutions de

$$(3.4) \int_{\Omega} C_1^n \cdot w_i \, dx + \mu \int_{\Omega} D_{11}(C_1^{n-1}, C_2^{n-1}) \nabla C_1^n \cdot \nabla w_i \, dx + \mu \int_{\Omega} D_{12}(C_1^{n-1}, C_2^{n-1}) \nabla C_2^n \cdot \nabla w_i \, dx = \int_{\Omega} f_1 \cdot w_i \, dx$$

$$(3.5) \int_{\Omega} C_2^n \cdot w_i \, dx + \mu \int_{\Omega} D_{21}(C_1^{n-1}, C_2^{n-1}) \nabla C_1^n \cdot \nabla w_i \, dx + \mu \int_{\Omega} D_{22}(C_1^{n-1}, C_2^{n-1}) \nabla C_2^n \cdot \nabla w_i \, dx = \int_{\Omega} f_2 \cdot w_i \, dx$$

$$i = 1, 2, \dots, p$$

Si l'on met en oeuvre l'algorithme de point fixe, pour résoudre en fait le vrai problème à l'intérieur du pas de temps, on aura une suite de problèmes linéaires analogues à (3.4) (3.5) (se reporter au cas à 1 impureté pour plus de précisions).

Si ces problèmes sont résolus par une méthode itérative de type surrelaxation par blocs (ici les blocs seront de dimensions 2, - de dimension m dans le cas général-) et si on confond l'index de la méthode de point fixe avec l'index de la méthode itérative, on obtiendra l'analogue de l'algorithme 3 (variante itérative de linéarisation) pour le cas vectoriel.

En adoptant cette stratégie, on a en chaque point du maillage à effectuer la résolution d'un système linéaire $m \times m$ au lieu d'une simple division.

3.2 - Remarques

En fait, il n'est pas nécessaire de résoudre complètement le système $m \times m$ en chaque point, mais il suffit par exemple d'effectuer un balayage de type relaxation.

Ce faisant, cela revient à mettre en oeuvre une variante de relaxation ponctuelle sur le système global, et par là même conduit à une implantation plus immédiate.

C'est cette technique (donnant un bon compromis entre efficacité du logiciel et effort de programmation) qui a été retenue dans le logiciel de simulation TITAN utilisé au CNET.

Les résultats présentés plus loin ont été réalisés avec la variante itérative de linéarisation par blocs.

Dans le cas où une impureté supporte une condition de Dirichlet et que l'autre est laissée "libre", alors au point considéré le système 2×2 dégénère en une seule équation, et il faudra envisager toutes les possibilités dans le logiciel. Ces contraintes sont prises plus facilement en compte la technique qui a été implémentée dans TITAN.

3.3 - Relaxation non linéaire par blocs

Nous allons maintenant donner la formulation de l'algorithme E.G.S.N par blocs. Comme nous l'avons vu au paragraphe précédent, c'est un algorithme robuste, ne nécessitant qu'un minimum de place mémoire, et somme toutes relativement facile à mettre en œuvre.

Le problème que l'on veut résoudre est donc le suivant.

$$(3.6) \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } \vec{C}^n \in \mathcal{V} \text{ tel que} \\ \int_{\Omega} \vec{C}^n \cdot \vec{\varphi} \, dx + \mu \int_{\Omega} [\mathcal{D}(\vec{C}^n) \nabla \vec{C}^n] \cdot \nabla \vec{\varphi} \, dx = \int_{\Omega} \vec{f} \cdot \vec{\varphi} \, dx \quad \forall \vec{\varphi} \in \mathcal{V} \end{array} \right.$$

Reprenant les notations du paragraphe I, avec les extrapolations évidentes, on pourra décrire l'algorithme E.G.S.N. par blocs par la formule suivante (cas $m=2$),

$$(3.7) \quad \begin{pmatrix} C_{1,i}^{k+1} \\ C_{2,i}^{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{1,i}^k \\ C_{2,i}^k \end{pmatrix} - \omega \begin{bmatrix} \frac{\partial F_{1,i}}{\partial C_{1,i}} & \frac{\partial F_{1,i}}{\partial C_{2,i}} \\ \frac{\partial F_{2,i}}{\partial C_{1,i}} & \frac{\partial F_{2,i}}{\partial C_{2,i}} \end{bmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} F_{1,i}(\vec{C}_{1,i}^{k+1}, \vec{C}_{2,i}^{k+1}, \dots, \vec{C}_{i-1,i}^{k+1}, \vec{C}_{i+1,i}^k, \dots, \vec{C}_{p,i}^k) \\ F_{2,i}(\vec{C}_{1,i}^{k+1}, \vec{C}_{2,i}^{k+1}, \dots, \vec{C}_{i-1,i}^{k+1}, \vec{C}_{i+1,i}^k, \dots, \vec{C}_{p,i}^k) \end{pmatrix}$$

Le Jacobien local étant évalué en $(\vec{C}_{1,i}^{k+1}, \dots, \vec{C}_{i-1,i}^{k+1}; \vec{C}_{i+1,i}^k, \dots, \vec{C}_{p,i}^k)$. La généralisation pour $m \geq 2$ est immédiate. On a donc en général pour chaque noeud i du maillage, encore un système $m \times m$ à résoudre (*linéaire*)

Nous allons maintenant formuler la méthode de Newton-Raphson à laquelle nous pourrions évidemment appliquer la variante itérative par blocs, qui constituera la généralisation de l'algorithme I-3.6.

3.4 - Méthode de Newton-Raphson

Rappelons ici, la méthode de Newton-Raphson, dans le cas général de résolution d'un système non linéaire dans \mathbb{R}^m

$$(3.8) \quad \vec{F}(\vec{u}) = \vec{0}$$

c'est à dire

$$(3.9) \quad \begin{cases} F_1(u_1, u_2, \dots, u_m) = 0 \\ F_2(u_1, u_2, \dots, u_m) = 0 \\ \vdots \\ F_m(u_1, u_2, \dots, u_m) = 0 \end{cases}$$

Cette technique donne lorsqu'on l'applique à (3.9), la suite de problèmes linéaire indices par k (il est donc nécessaire de se donner une solution initiale u^0 pour amorcer le processus)

$$(3.10) \quad \begin{bmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial u_1}^{(k)} & \frac{\partial F_1}{\partial u_2}^{(k)} & \dots & \frac{\partial F_1}{\partial u_m}^{(k)} \\ \frac{\partial F_2}{\partial u_1}^{(k)} & \frac{\partial F_2}{\partial u_2}^{(k)} & \dots & \frac{\partial F_2}{\partial u_m}^{(k)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial F_m}{\partial u_1}^{(k)} & \frac{\partial F_m}{\partial u_2}^{(k)} & \dots & \frac{\partial F_m}{\partial u_m}^{(k)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1^{k+1} - u_1^k \\ u_2^{k+1} - u_2^k \\ \vdots \\ u_m^{k+1} - u_m^k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F_1(u_1^k, u_2^k, \dots, u_m^k) \\ F_2(u_1^k, u_2^k, \dots, u_m^k) \\ \vdots \\ F_m(u_1^k, u_2^k, \dots, u_m^k) \end{bmatrix}$$

Le vecteur u^{k+1} est la solution du système linéaire (3.10) dont la matrice est le Jacobien de l'application F au point u^k .

Appliqué à (2.3) la méthode de Newton-Raphson conduit à (cas continu)

Trouver $\vec{c}^{n,k+1} \in \mathcal{V}$ solution de

$$(3.11) \quad \begin{cases} \int_{\Omega} \vec{c}^{n,k+1} \cdot \vec{\varphi} \, dx + \mu \int_{\Omega} [\mathcal{D}(\vec{c}^{n,k}) \nabla \vec{c}^{n,k+1}] \cdot \nabla \vec{\varphi} \, dx + \\ \mu \int_{\Omega} \left[\left\{ \sum_{i=1}^m c_i^{n,k+1} D'_i(\vec{c}^{n,k}) \right\} \nabla \vec{c}^{n,k} \right] \cdot \nabla \vec{\varphi} \, dx = \\ \int_{\Omega} \vec{f} \cdot \vec{\varphi} \, dx + \mu \int_{\Omega} \left[\left\{ \sum_{i=1}^m c_i^{n,k} D'_i(\vec{c}^{n,k}) \right\} \nabla \vec{c}^{n,k} \right] \cdot \nabla \vec{\varphi} \, dx \quad \forall \vec{\varphi} \in \mathcal{V}_0 \end{cases}$$

(3.11) est une écriture condensée du détail ci-après.

Considérons le cas où deux impuretés sont en présence, et intéressons nous plus particulièrement à la première équation (la deuxième s'obtiendra de façon analogue). Appliquant la formule (3.10) on obtient (nous n'avons pas inscrit l'indice n correspondant à la discrétisation en temps).

$$\begin{aligned}
 & \int_{\Omega} (C_1^{k+1} - C_1^k) \varphi_1 \, dx \\
 & + \mu \int_{\Omega} D_{11}(\vec{C}^k) \nabla (C_1^{k+1} - C_1^k) \cdot \nabla \varphi_1 \, dx \\
 & + \mu \int_{\Omega} D'_{11, C_1}(\vec{C}^k) \nabla C_1^k \cdot \nabla \varphi_1 (C_1^{k+1} - C_1^k) \, dx \\
 & + \mu \int_{\Omega} D'_{12, C_2}(\vec{C}^k) \nabla C_2^k \cdot \nabla \varphi_1 (C_1^{k+1} - C_1^k) \, dx \\
 & + \mu \int_{\Omega} D'_{11, C_2}(\vec{C}^k) \nabla C_1^k \cdot \nabla \varphi_1 (C_2^{k+1} - C_2^k) \, dx \\
 & + \mu \int_{\Omega} D_{12}(\vec{C}^k) \nabla (C_2^{k+1} - C_2^k) \cdot \nabla \varphi_1 \, dx \\
 & + \mu \int_{\Omega} D'_{12, C_2}(\vec{C}^k) \nabla C_2^{k+1} \cdot \nabla \varphi_1 (C_2^{k+1} - C_2^k) \, dx \\
 & = - \left[\int_{\Omega} C_1^k \cdot \varphi_1 \, dx + \mu \int_{\Omega} D_{11}(\vec{C}^k) \nabla C_1^k \cdot \nabla \varphi_1 \, dx \right. \\
 & \quad \left. + \mu \int_{\Omega} D_{12}(\vec{C}^k) \nabla C_2^k \cdot \nabla \varphi_1 \, dx - \int_{\Omega} f_1 \cdot \varphi_1 \, dx \right]
 \end{aligned}$$

Certains termes s'éliminent deux à deux.

On pourra voir en annexe III, des formules donnant les différentes dérivées intervenant dans les algorithmes.

4 - Expériences numériques - Résultats

Nous reprenons ici le problème test A donné au paragraphe précédent : Prédépot d'Arsenic à 1000° degrés C durant 20 minutes dans du silicium uniformément dopé en Bore.

Au cours des expériences numériques, nous ferons varier cette concentration initiale (uniforme) du bore et nous comparerons les résultats de la diffusion couplée avec les résultats obtenus où seul l'Arsenic est supposé diffuser.

Nous avons fait une synthèse des résultats obtenus sur la figure 52. Sur cette figure on a représenté la variation de la profondeur de jonction ainsi que la variation de la diffusion latérale en fonction de la concentration initiale, supposée uniforme, de bore. Le pas de temps maximum pour la simulation a été pris à 0.625 mn (selon la stratégie déjà indiquée au paragraphe I). Pour la simulation de la diffusion à une seule impureté (A_s), nous avons retenu le schéma de GEAR ; pour la diffusion couplée nous avons considéré les deux schéma : IMPLICITE et GEAR.

On constate que lorsque la concentration en bore est faible, la simulation à une ou deux impuretés donnent des résultats à peu près équivalents; par contre lorsque la concentration en bore augmente, alors les résultats divergent fortement. Alors qu'avec la diffusion à 1 impureté on trouve toujours une jonction (c'est à dire une "ligne" où la concentration en bore égale la concentration en Arsenic) si la concentration initiale de bore est inférieure ou égale à la concentration d'Arsenic à la frontière, il se peut, lors de la simulation de la diffusion couplée qu'aucune jonction ne soit réalisée pour des conditions semblables.

Nous avons reporté sur la figure 53 des comparaisons sur les doses d'Arsenic injectées dans le silicium lors du predepot à 1000° durant 20 mn.

Nous avons indiqué comment varie cette dose en fonction de la concentration initiale de bore ; les résultats sont indiqués pour la simulation de la diffusion couplée et pour la diffusion d'une seule impureté.

Dans les tableaux qui suivent nous donnons des résultats qui permettent de comparer le comportement des algorithmes pour différents pas de temps maximum ainsi que les similitudes et les différences entre la simulation d'une impureté diffusante et la simulation de la diffusion de deux impuretés couplées.

Nous pouvons de même comparer les temps nécessaires pour chaque algorithme, variante itérative de linéarisation par blocs, méthode de relaxation non linéaire par blocs (E.G.S.N.), et la variante itérative par blocs de Newton-Raphson sur des exemples particuliers.

ALGORITHME : VARIANTE ITERATIVE DE LINEARISATION (BLOCS)

PREDEPOT d'AS : Concentration normalisée à la frontière : 17.6

DIFFUSION COUPLEE : Concentration initiale en BORE : $1.76 \cdot 10^{-4}$

SCHEMA EN TEMPS : GEAR

τ_{max}	Prof. jonchon	Diff. latérale	Nb. balayages	Moyenne par pas de temps	DOSE As	CPU
10 mn	0.1405	0.1149	103	8.58	$2.138 \cdot 10^6$	866
5 mn						
2.5 mn						
1.25 mn						
0.625 mn	0.1562	0.1292	252	6.63	$3.424 \cdot 10^6$	2291
0.156 mn	0.1567	0.1302	580	4.39	$3.489 \cdot 10^6$	6324

CAS DIFFUSION 1 SEULE IMPURETE : As

10 mn	0.1323	0.1083	105	8.8	$2.137 \cdot 10^6$	624
5 mn	0.1512	0.1220	125	9.7	$2.748 \cdot 10^6$	719
2.5 mn	0.1513	0.1220	154	9.6	$3.151 \cdot 10^6$	876
1.25 mn	0.1526	0.1235	193	8.4	$3.335 \cdot 10^6$	1118
0.625 mn	0.1538	0.1253	256	6.8	$3.424 \cdot 10^6$	1543
0.3125 mn	0.1547	0.1260	363	5.2	$3.467 \cdot 10^6$	2919

ALGORITHME : VARIANTE ITERATIVE DE LINEARISATION (BLOCS)

PREDEPOT d'AS : Concentration normalisée à la frontière : 17.6

DIFFUSION COUPLEE : Concentration initiale en BORE : 0.176

SCHEMA EN TEMPS : GEAR

τ_{max}	Prof. jonchon	Diff. latérale	Nb. balayages	Moyenne par pas de temps	DOSE As	CPU
10 mn	0.0968	0.0718	104	8.67	$2.122 \cdot 10^6$	859
5 mn						
2.5 mn						
1.25 mn						
0.625 mn	0.1252	0.0967	251	6.61	$3.396 \cdot 10^6$	2257
0.156 mn	0.1286	0.0985	580	4.39	$3.461 \cdot 10^6$	6237

CAS DIFFUSION 1 SEULE IMPURETE : As

10 mn	0.0867	0.0648	105	8.68	$2.128 \cdot 10^6$	623
5 mn	0.1061	0.0780	124	9.5	$2.736 \cdot 10^6$	713
2.5 mn	0.1106	0.0839	153	9.5	$3.137 \cdot 10^6$	871
1.25 mn	0.1183	0.0883	193	8.4	$3.320 \cdot 10^6$	1113
0.625 mn	0.1206	0.0906	256	6.73	$3.409 \cdot 10^6$	1538
0.3125 mn	0.1225	0.0899	363	5.2	$3.452 \cdot 10^6$	2925

ALGORITHME : VARIANTE ITERATIVE DE LINEARISATION (BLOCS)

PREDEPOT d'AS : Concentration normalisée à la frontière : 17.6

DIFFUSION COUPLEE : Concentration initiale en BORE : 1.76

SCHEMA EN TEMPS : GEAR

τ_{max}	Prof. jonction	Diff. latérale	Nb. balayages	Moyenne par pas de temps	DOSE As	CPU
10 mn	0.0708	0.0443	127	10.58	$1.943 \cdot 10^6$	973
5 mn	0.0863	0.0557	157	12.08	$2.485 \cdot 10^6$	1150
2.5 mn	0.0956	0.0625	186	11.68	$2.839 \cdot 10^6$	1374
1.25 mn	0.0995	0.0661	220	9.57	$2.948 \cdot 10^6$	1710
0.625 mn	0.1015	0.0678	270	7.11	$3.075 \cdot 10^6$	2322
0.156 mn	0.1043	0.0690	584	4.42	$3.132 \cdot 10^6$	6202

CAS DIFFUSION 1 SEULE IMPURETE : As

10 mn	0.0583	0.0385	107	9.0	$2.045 \cdot 10^6$	630
5 mn	0.0754	0.0500	123	9.4	$2.626 \cdot 10^6$	719
2.5 mn	0.0846	0.0587	153	9.5	$3.009 \cdot 10^6$	869
1.25 mn	0.0914	0.0630	194	8.4	$3.184 \cdot 10^6$	1117
0.625 mn	0.0935	0.0643	256	6.73	$3.267 \cdot 10^6$	1538
0.3125 mn	0.0905	0.0652	373	5.4	$3.309 \cdot 10^6$	2453

PREDEPOT d'As : CONCENTRATION NORMALISEE A LA FRONTIERE 17.6
 DIFFUSION COUPLEE - CONCENTRATION INITIALE DE BORE 1.76

τ_{max}	LIN_IT			NEW-IT		
	Prof. jonction	diff. latérale	CPU	Prof. jonction	diff. latérale	CPU
0.3125 mn						
IMPLICITE	0.1053	0.0699	3818	0.1053	0.0699	4609
GEAR	0.1034	0.0686	3586	0.1034	0.0686	4340

τ_{max}	LIN_IT			EGSN		
	Prof. jonction	diff. latérale	CPU	Prof. jonction	diff. latérale	CPU
2.5 mn						
IMPLICITE	0.1072	0.0701	1673			
GEAR	0.0956	0.0625	1374	0.0956	0.0625	3501

D'après les différents essais numériques réalisés avec les trois algorithmes itératifs par blocs, on peut déduire qu'il faut

6.3 unités de temps par balayage pour l'algorithme variante itérative de linéarisation (par blocs).

9.1 unités de temps par balayage pour l'algorithme variante itérative par blocs de Newton-Raphson.

16.2 unités de temps par balayage pour l'algorithme de relaxation non linéaire par blocs.

L'unité de temps dépend bien évidemment de l'ordinateur utilisé.

Sur les figures 54 à 62, nous avons représenté la distribution finale des impuretés, après pré-dépot d'Arsenic à 1000°C durant 20 mn, dans le silicium uniformément dopé en bore. ($1.76 \cdot 10^{-4}$, 1.76 et 5 en valeurs normalisées).

La figure 54 présente la distribution d'Arsenic obtenue à la fin du process, pour du silicium uniformément dopé B = $1.76 \cdot 10^{-4}$.

La distribution obtenue est pratiquement la même que celle obtenue lors de la diffusion d'une seule impureté (fig. 40).

Les figures 55-56 donnent la distribution de bore à la fin du process. (la concentration reste évidemment constante lors de la diffusion à une seule impureté).

Les figures 57 à 59 donnent des résultats analogues lorsque la concentration initiale de bore est 1.76.

Pour les figures 60 à 62 on a pris comme dopage initial en bore la valeur 5. Avec cette valeur, on se trouve à la limite de réalisation de jonction.

Un autre problème a aussi été testé : nous avons simulé la redistribution d'Arsenic et de bore en ambiance inerte après une double implantation ionique

- implantation d'Arsenic 80 Kev et dose $1.E15 \text{ cm}^{-2}$
- implantation de bore 30 Kev et dose $1.E12 \text{ cm}^{-2}$

La redistribution s'est faite à 1000°C , pendant 20 minutes.

Les figures 63 et 64 donnent la repartition d'Arsenic à la fin du process ; les figures 65 à 67 donnent différentes vue de la distribution de bore, toujours en fin de process.

Sur la figure 68 nous avons représenté la fonction $|C_A - C_B|$ qui est aussi très utile pour le technologue.

JUNCTION DEPTH - LATERAL DIFFUSION (μm)

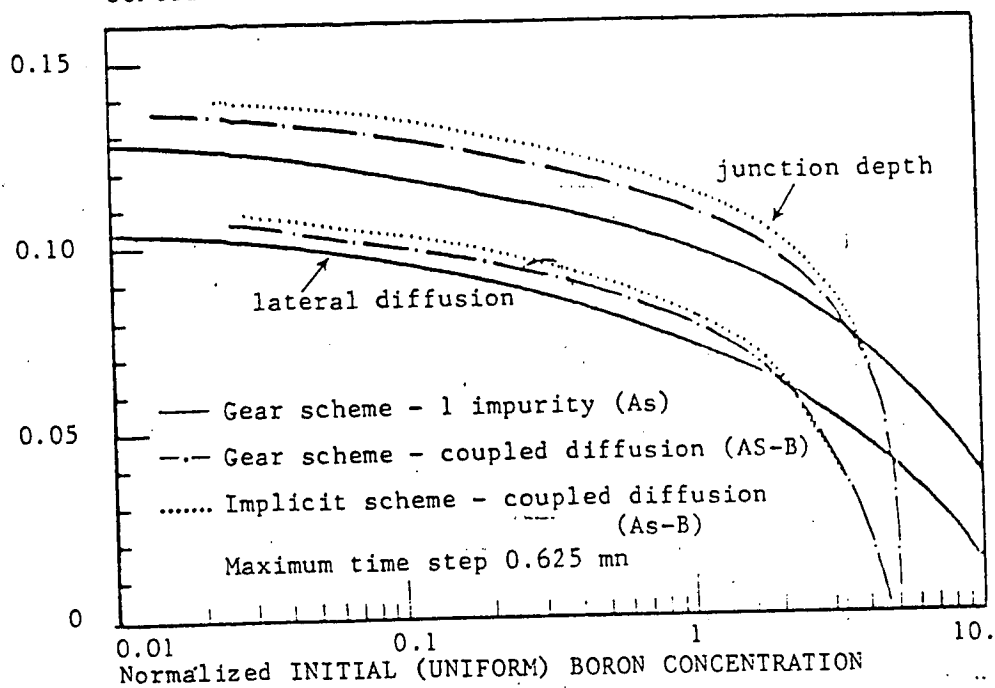


Figure 52

ARSENIC DOSE

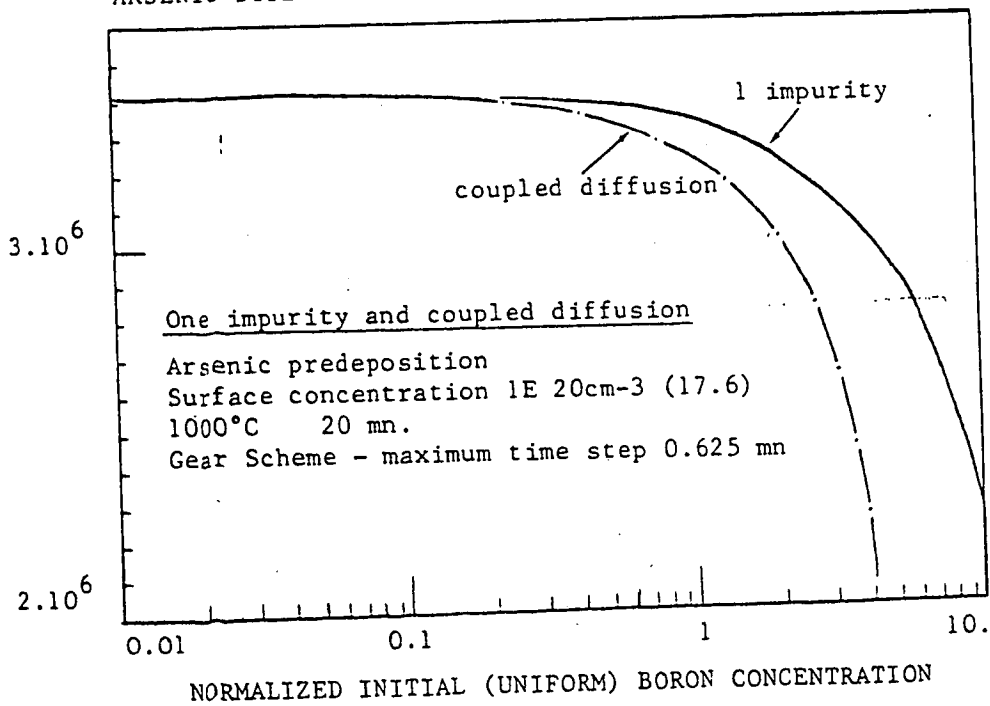


Figure 53

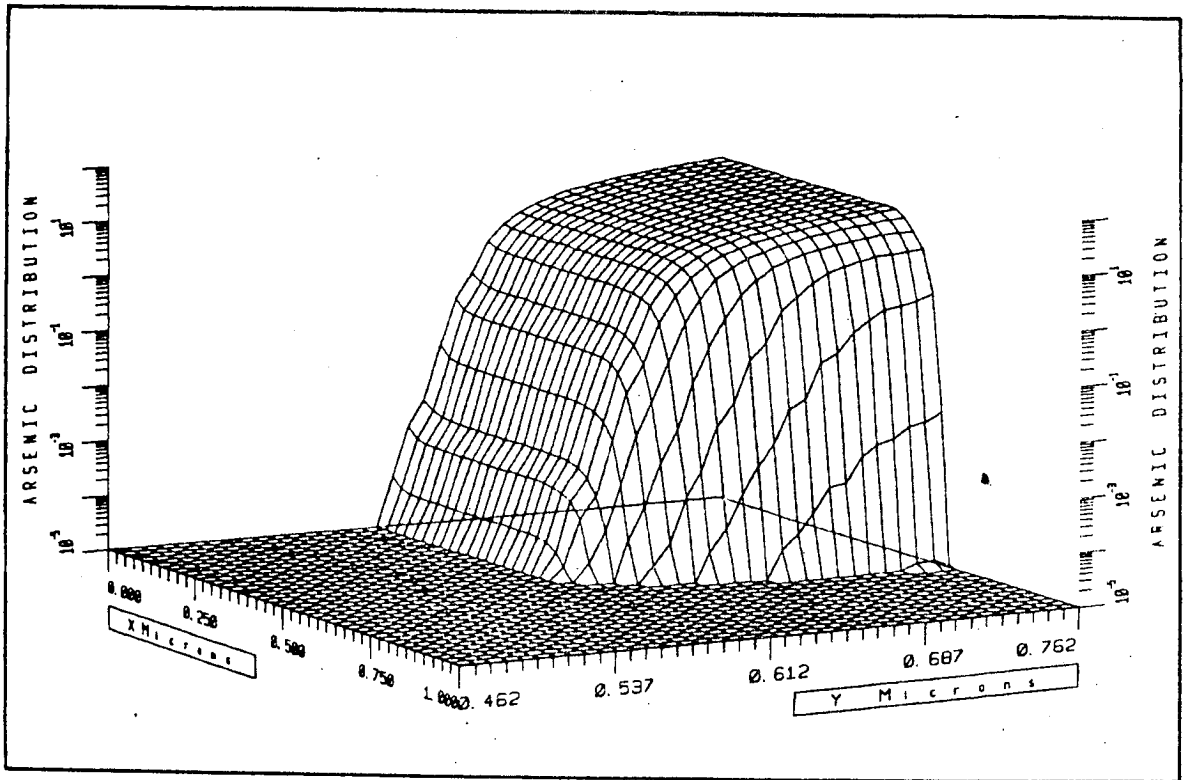


Fig: 54 COUPLED DIFFUSION ARSENIC PLOT * Normalized *
 BORON DOPED SUBSTRAT $1E15 \text{ cm}^{-3}$ ($1.76E-4$)
 ARSENIC PREDEPOSITION SURFACE CONCENTRATION $1E20 \text{ cm}^{-3}$
 1000 Degrees 20 mn

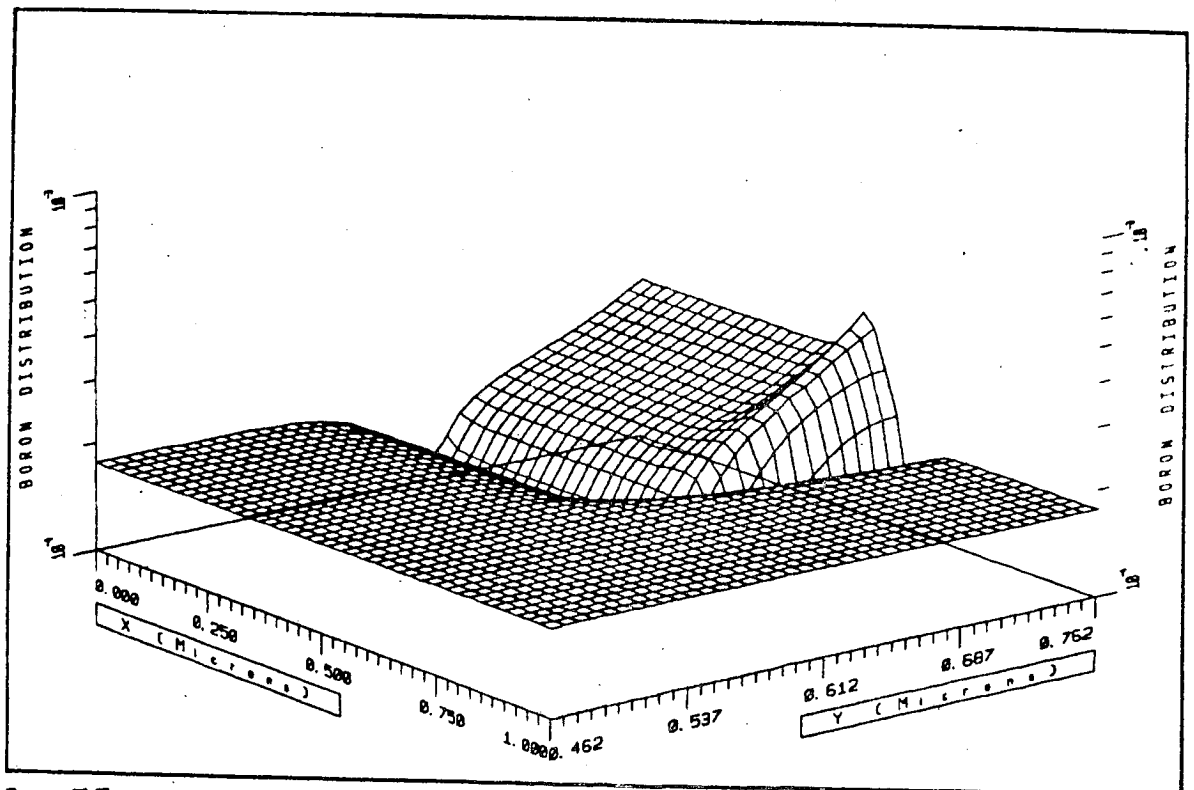


Fig: 55 COUPLED DIFFUSION BORON PLOT (Normalized)
 BORON DOPED SUBSTRAT $1E15 \text{ cm}^{-3}$ ($1.76E-4$)
 ARSENIC PREDEPOSITION SURFACE CONCENTRATION $1E20 \text{ cm}^{-3}$ * 17.6 *
 1000 Degrees 20 mn

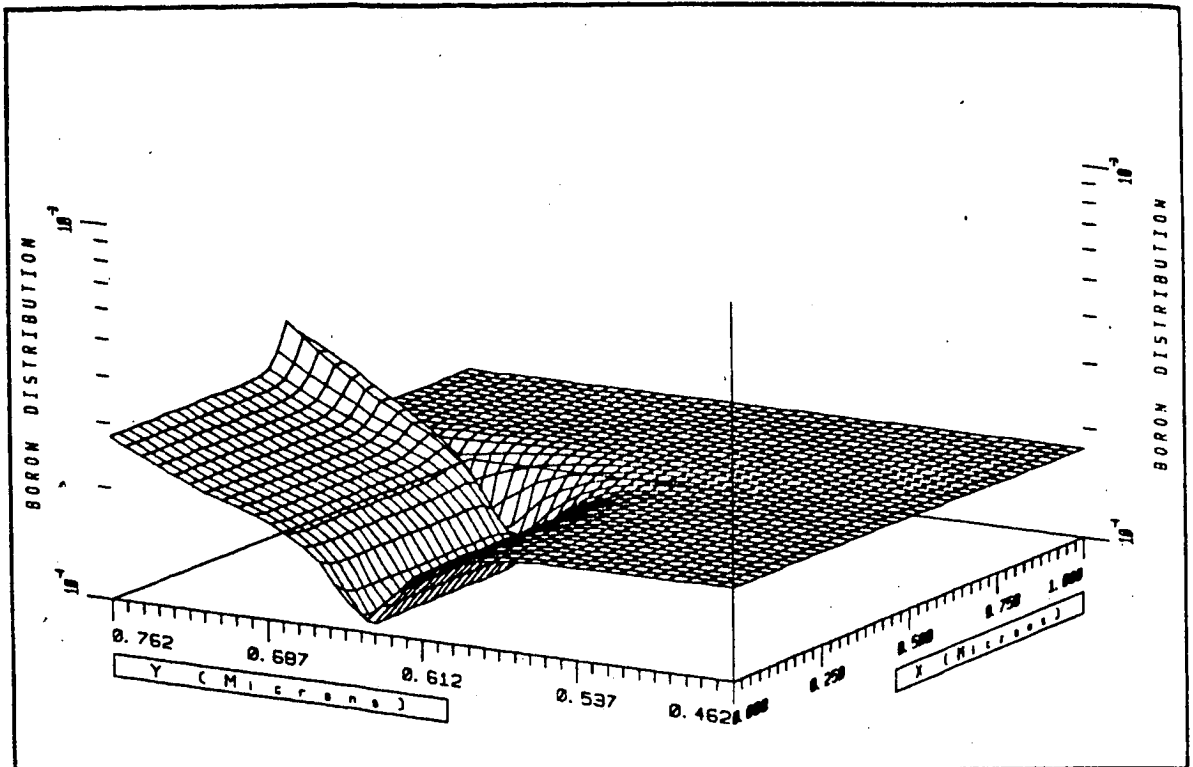


Fig: 56 COUPLED DIFFUSION BORON PLOT (Normalized)
 BORON DOPED SUBSTRAT $1E15 \text{ cm}^{-3}$ ($1.76E-4$)
 ARSENIC PREDEPOSITION SURFACE CONCENTRATION $1E20 \text{ cm}^{-3}$ * 17.6 *
 1000 Degrees 20 mn

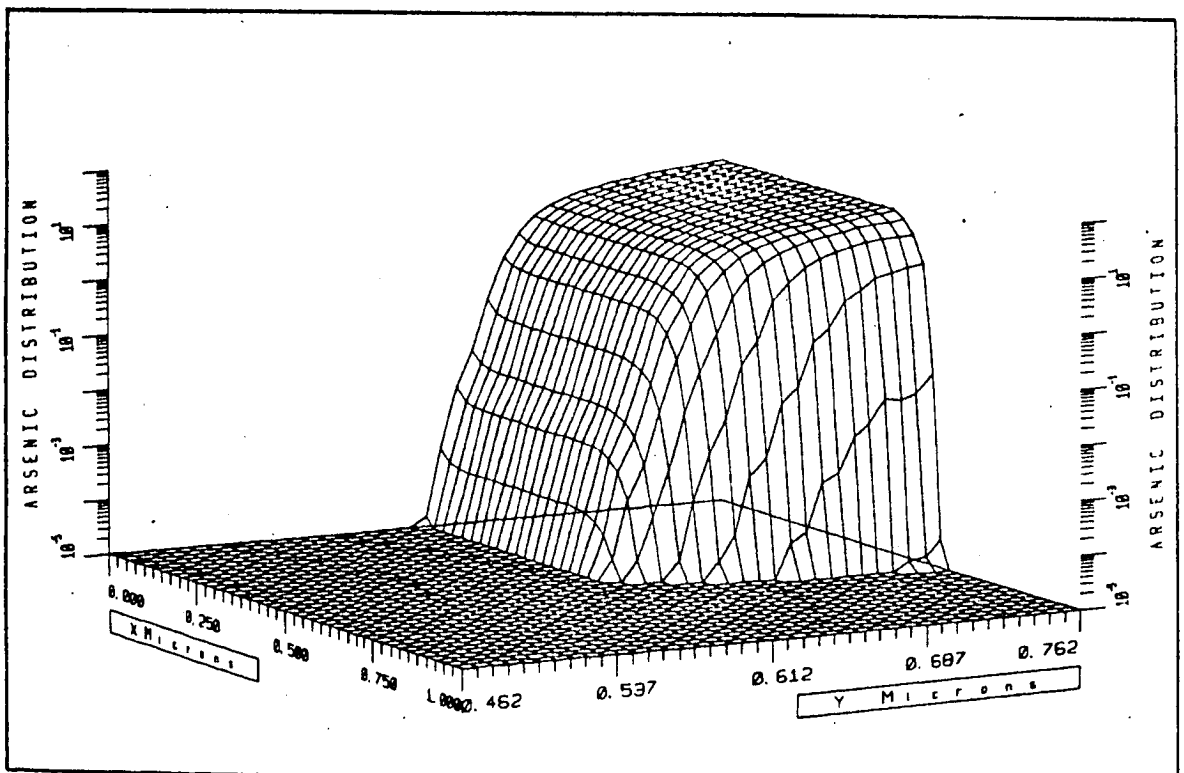


Fig: 57 COUPLED DIFFUSION ARSENIC PLOT (Normalized)
 BORON DOPED SUBSTRAT $1E19 \text{ cm}^{-3}$ (1.76)
 ARSENIC PREDEPOSITION SURFACE CONCENTRATION $1E20 \text{ cm}^{-3}$
 1000 Degrees 20 mn

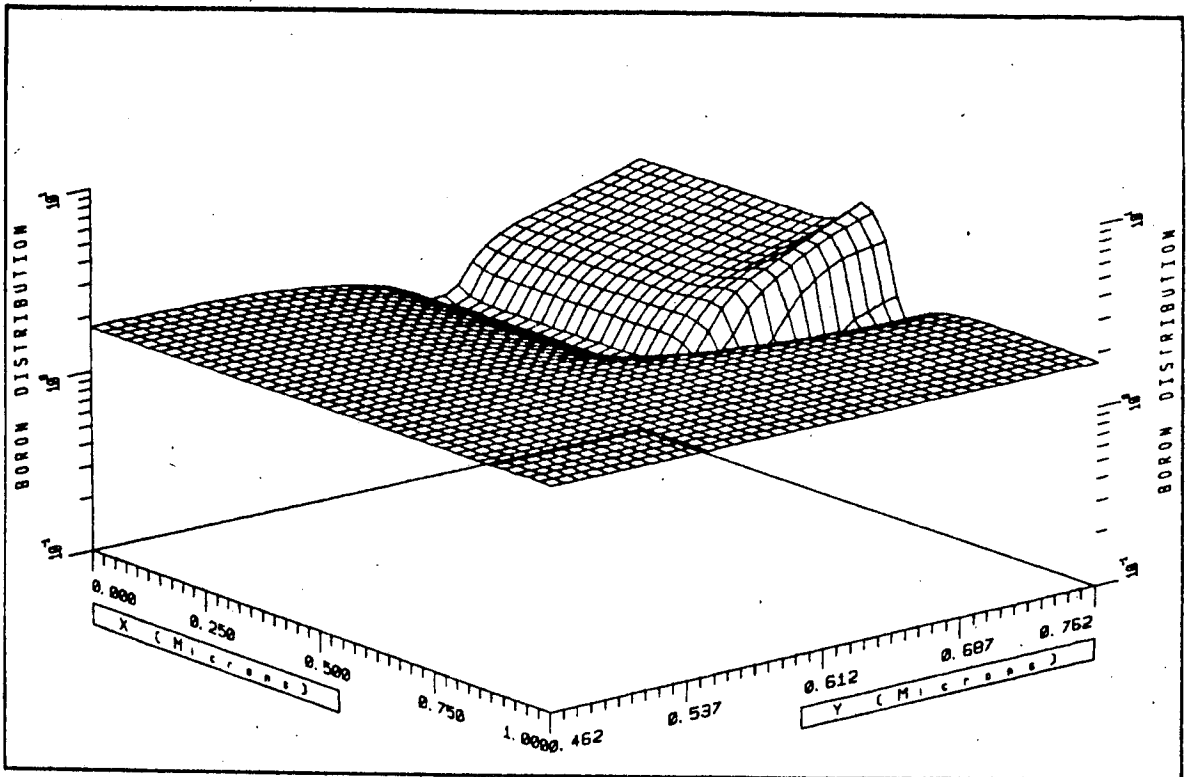


Fig: 58 COUPLED DIFFUSION BORON PLOT (Normalized)
 BORON DOPED SUBSTRAT $1E19 \text{ cm}^{-3}$ (1.76)
 ARSENIC PREDEPOSITION SURFACE CONCENTRATION $1E20 \text{ cm}^{-3}$ (17.6)
 1000 Degrees 20 mn

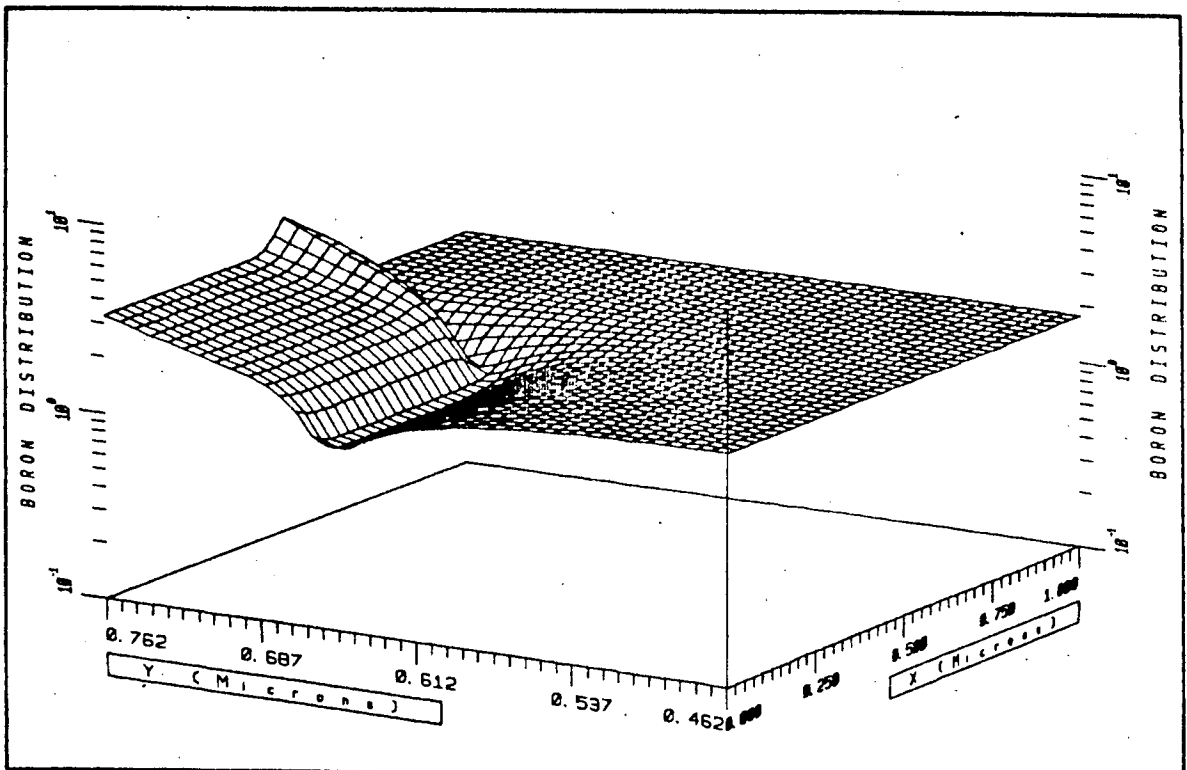


Fig: 59 COUPLED DIFFUSION BORON PLOT (Normalized)
 BORON DOPED SUBSTRAT $1E19 \text{ cm}^{-3}$ (1.76)
 ARSENIC PREDEPOSITION SURFACE CONCENTRATION $1E20 \text{ cm}^{-3}$ (17.6)
 1000 Degrees 20 mn

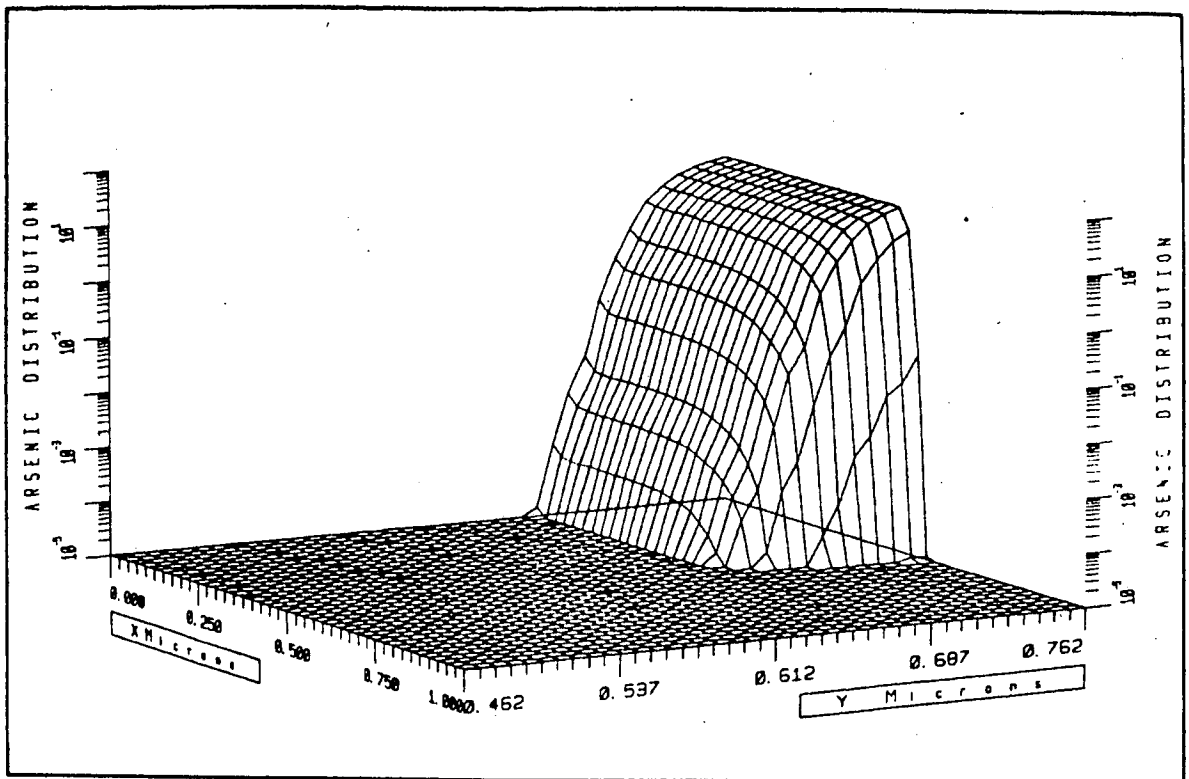


Fig: 60 COUPLED DIFFUSION ARSENIC PLOT (Normalized)
 BORON DOPED SUBSTRAT 5. (Normalized)
 ARSENIC PREDEPOSITION SURFACE CONCENTRATION 17.6 (Normalized)
 1000 Degrees 20 mn

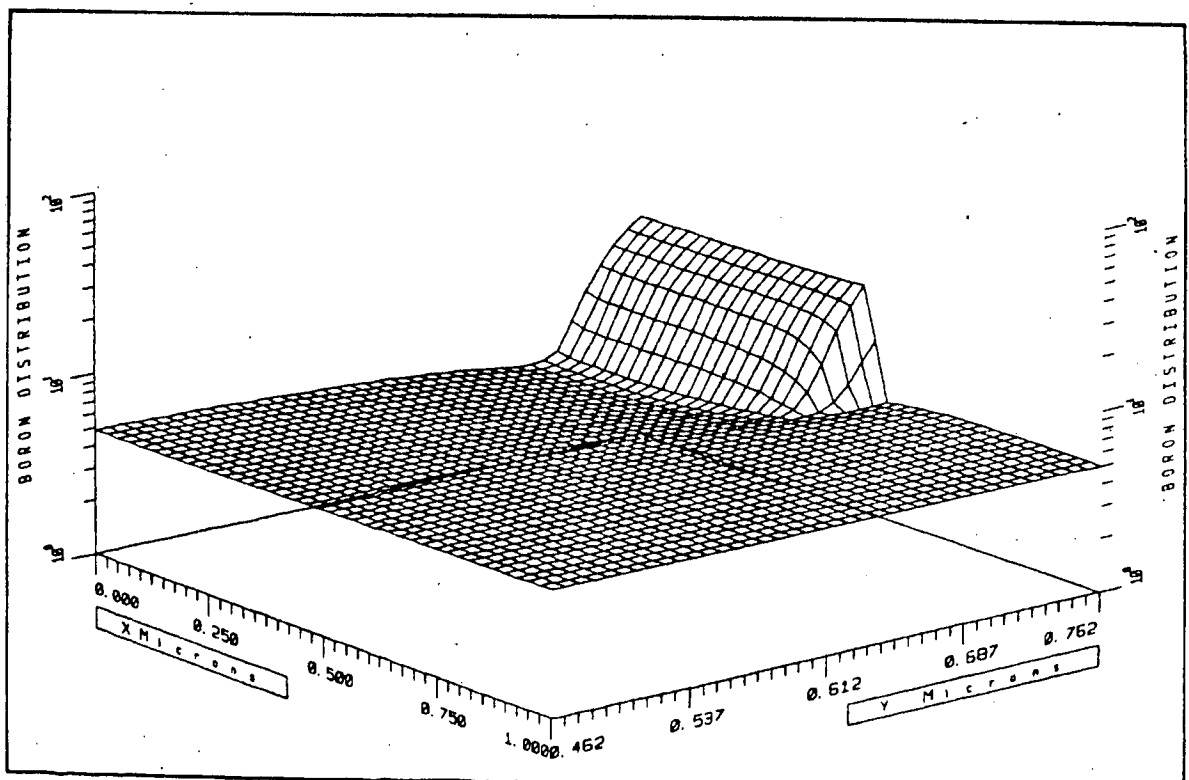


Fig: 61 COUPLED DIFFUSION BORON PLOT (Normalized)
 BORON DOPED SUBSTRAT 5. (Normalized)
 ARSENIC PREDEPOSITION SURFACE CONCENTRATION 17.6
 1000 Degrees 20 mn

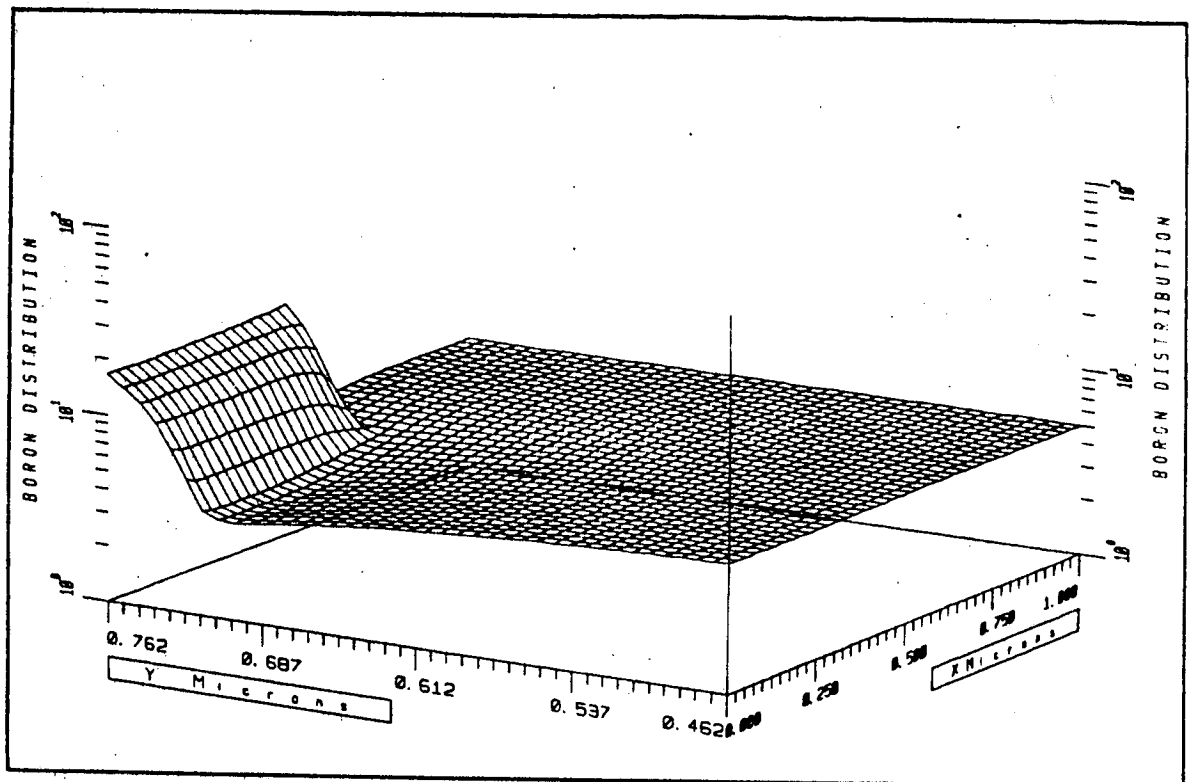


Fig: 62 COUPLED DIFFUSION BORON PLOT (Normalized)
 BORON DOPED SUBSTRAT 5. (Normalized)
 ARSENIC PREDEPOSITION SURFACE CONCENTRATION 17.6
 1000 Degrees 20 mn

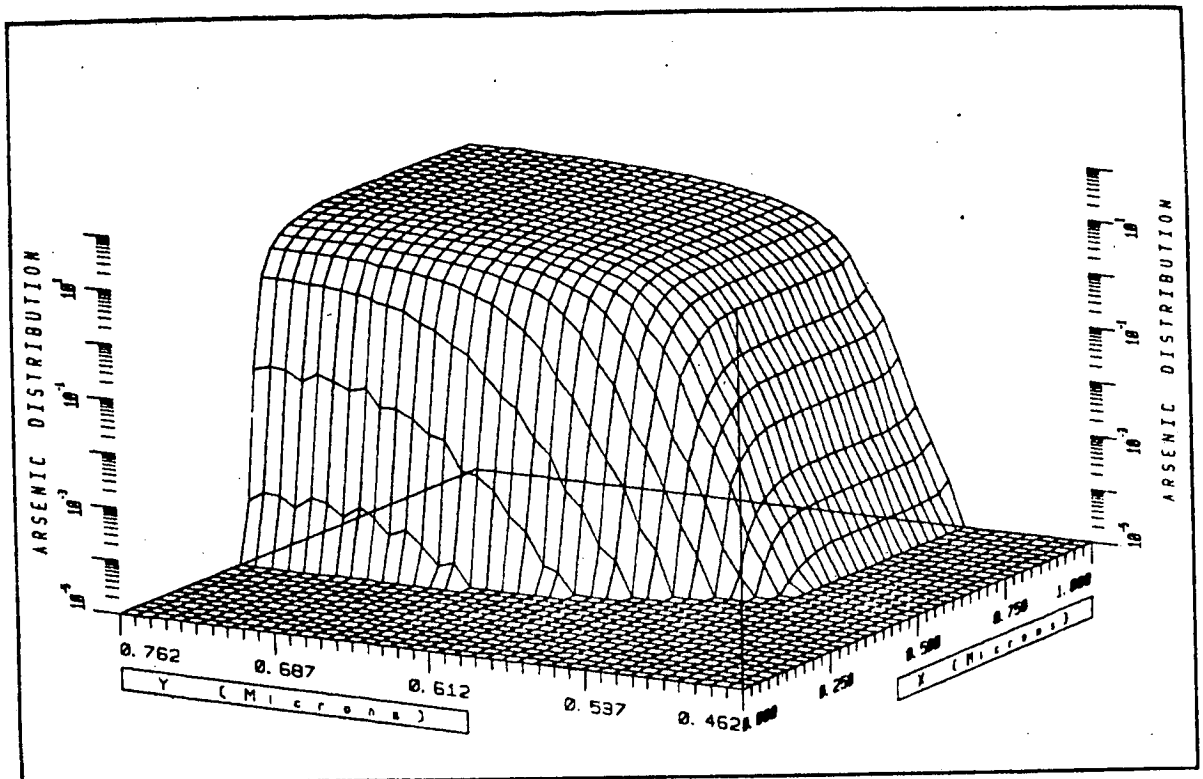


Fig: 63 COUPLED DIFFUSION ARSENIC PLOT (Normalized)
 STEPS 1: As ION IMPLANT 80 KeV 1E15 cm⁻²
 2: B ION IMPLANT 30 KeV 1E12 cm⁻²
 3: NEUTRAL AMBIENT DRIVE-IN 1000 Degrees 20 mn

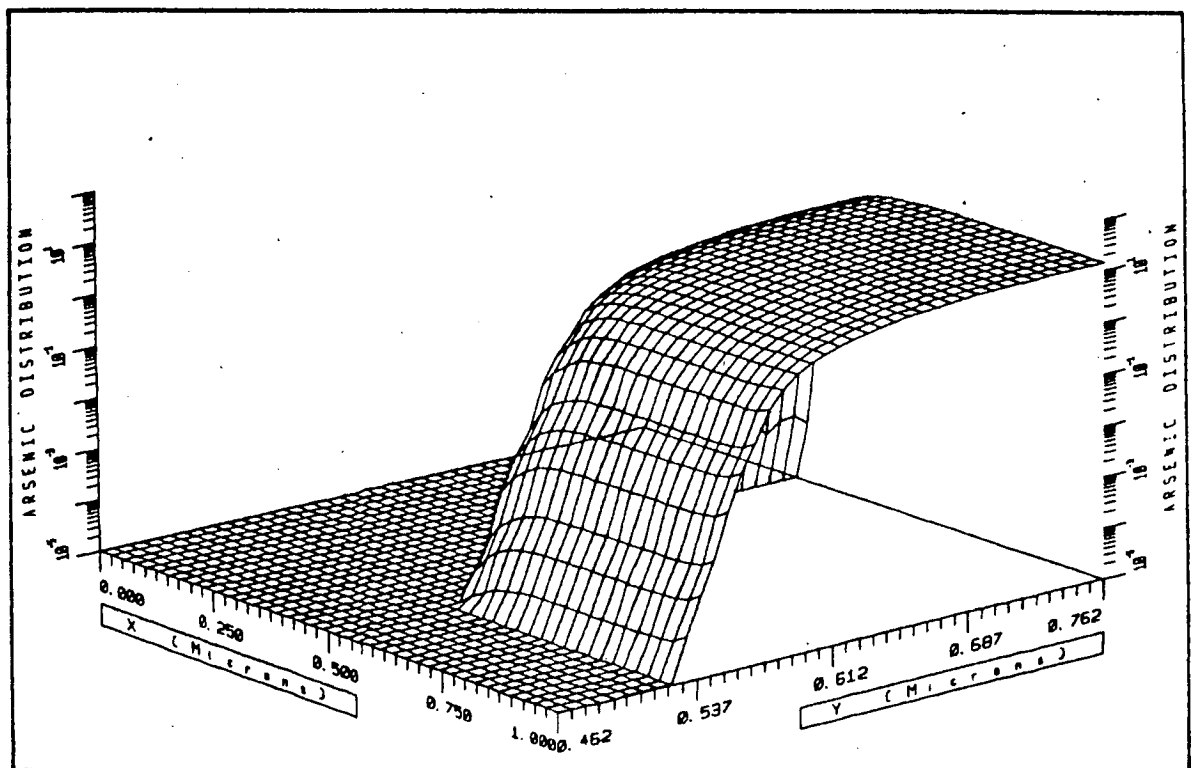


Fig: 64 COUPLED DIFFUSION ARSENIC PLOT (Normalized)
 STEPS 1: As ION IMPLANT 80 KeV 1E15 cm⁻²
 2: B ION IMPLANT 30 KeV 1E12 cm⁻²
 3: NEUTRAL AMBIENT DRIVE-IN 1000 Degrees 20 mn

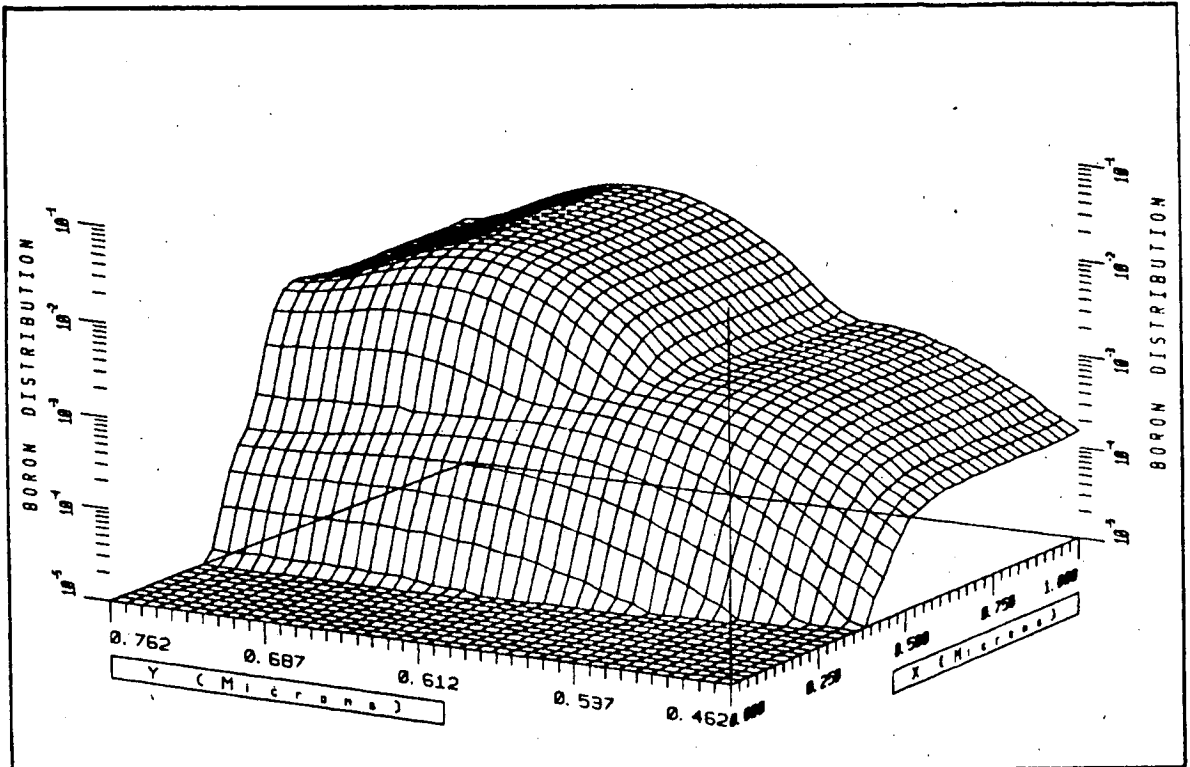


Fig: 65

STEPS

COUPLED DIFFUSION BORON PLOT (Normalized)

- 1: As ION IMPLANT 80 Kev 1E15 cm-2
- 2: B ION IMPLANT 30 Kev 1E12 cm-2
- 3: NEUTRAL AMBIENT DRIVE-IN 1000 Degrees 20 mn

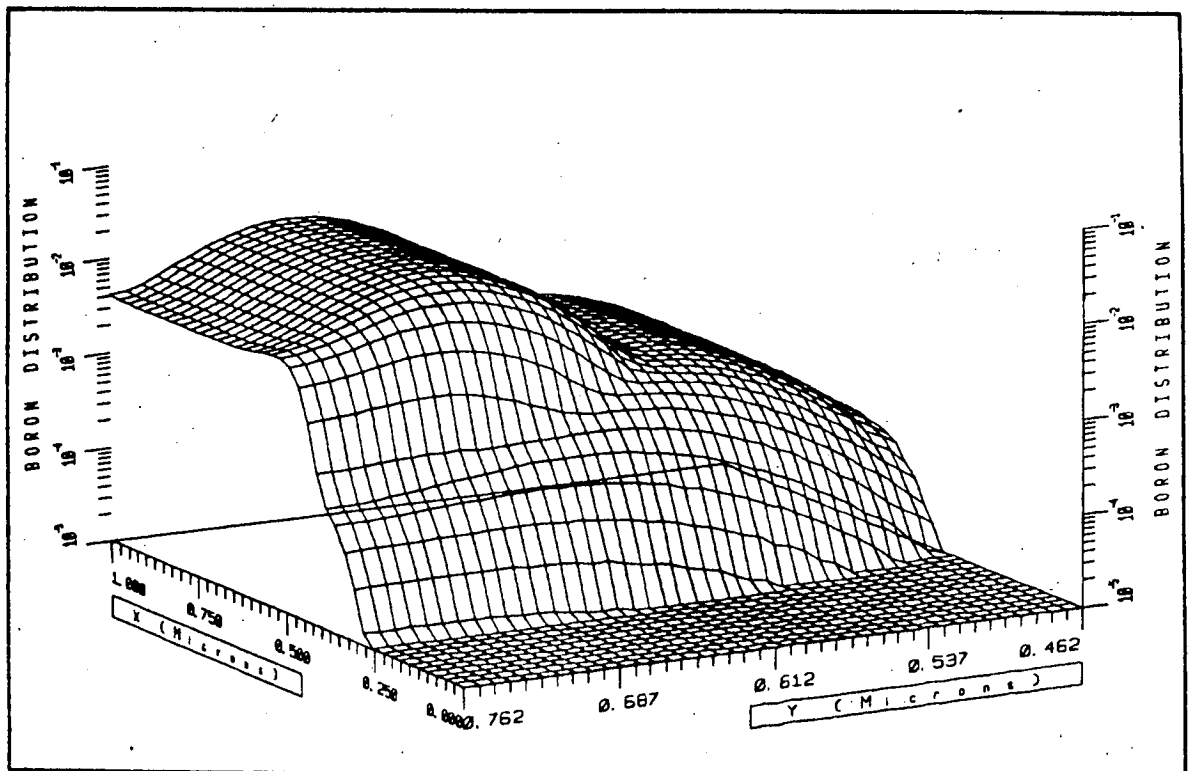


Fig: 66

STEPS

COUPLED DIFFUSION BORON PLOT (Normalized)

- 1: As ION IMPLANT 80 Kev 1E15 cm-2
- 2: B ION IMPLANT 30 Kev 1E12 cm-2
- 3: NEUTRAL AMBIENT DRIVE-IN 1000 Degrees 20 mn

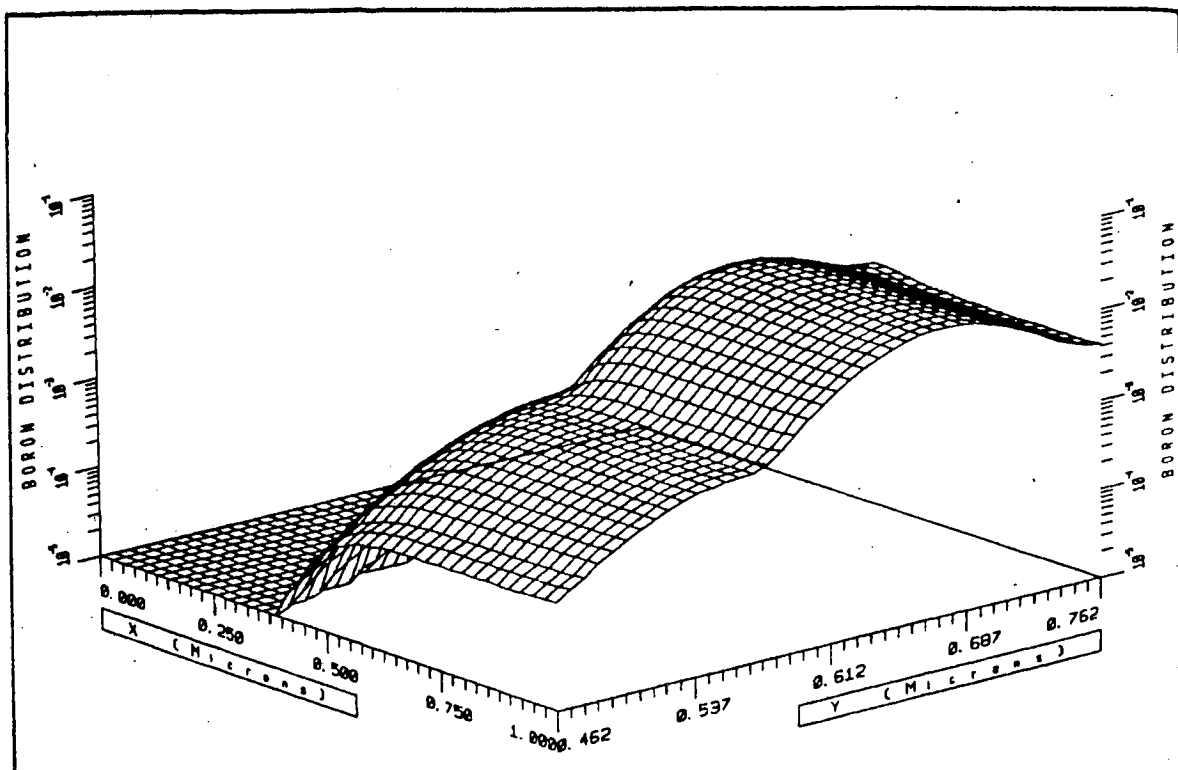


Fig: 67 COUPLED DIFFUSION BORON PLOT (Normalized)
 STEPS 1: As ION IMPLANT 80 KeV 1E15 cm-2
 2: B ION IMPLANT 30 KeV 1E12 cm-2
 3: NEUTRAL AMBIENT DRIVE-IN 1000 Degrees 20 mn

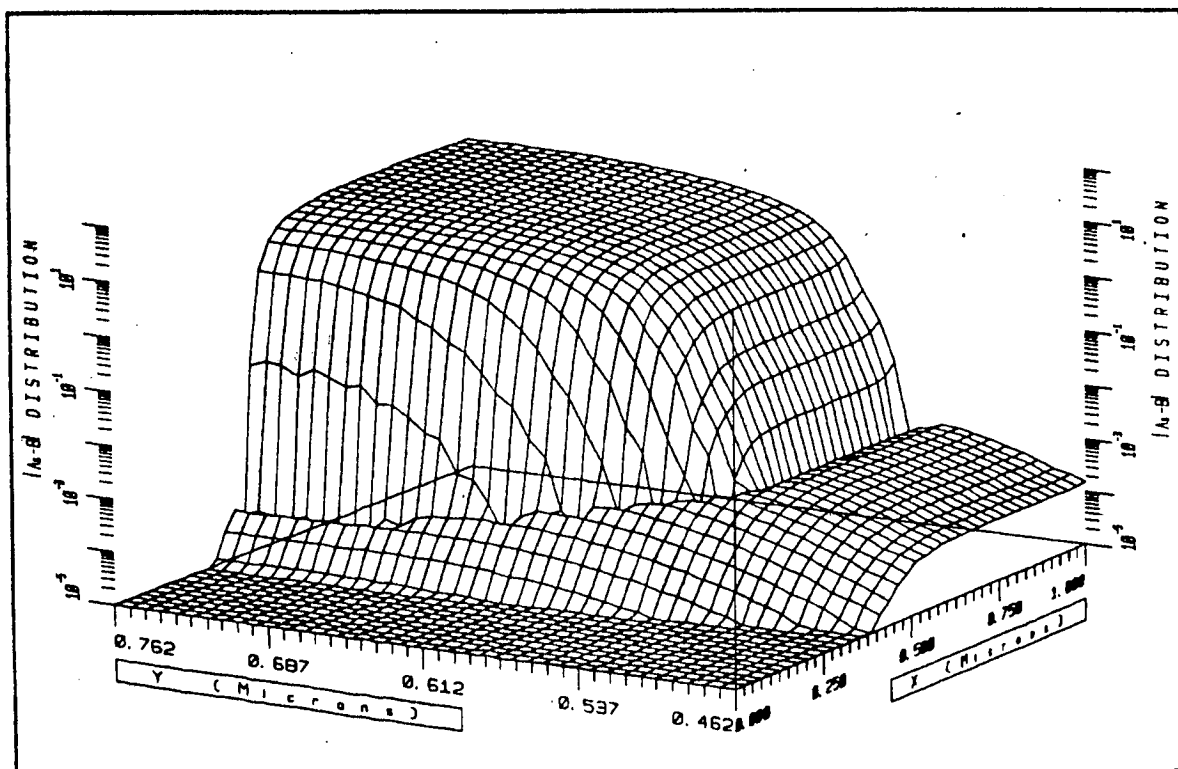


Fig: 68 COUPLED DIFFUSION |As-B| PLOT (Normalized)
 STEPS 1: As ION IMPLANT 80 KeV 1E15 cm-2
 2: B ION IMPLANT 30 KeV 1E12 cm-2
 3: NEUTRAL AMBIENT DRIVE-IN 1000 Degrees 20 mn

III - DIFFUSION D'IMPURETES DANS Si ET Si O₂ - SEGREGATION

Dans les paragraphes précédents, nous avons simulé numériquement la diffusion d'une ou plusieurs impuretés dans du silicium ; en supposant que l'oxyde recouvrant tout ou partie de la surface du silicium était un masque parfait à la diffusion d'impuretés, autrement dit qu'aucune impureté ne pouvait s'échapper à l'interface Si - Si O₂.

Cette approximation, justifiée dans la pratique, pour les cas traités aux paragraphes précédents a été vérifiée numériquement dans le présent contexte, c'est à dire en prenant en compte ce qui se passe effectivement dans l'oxyde. L'étude présente peut cependant présenter un intérêt car elle permet de simuler l'étape technologique suivante, à savoir, l'injection d'impuretés dans le silicium par oxyde dopé. On dépose une couche d'oxyde fortement dopée en impuretés (Arsenic ou bore par exemple) sur le silicium, on porte à haute température et on "regarde" ce qui se passe dans le milieu silicium + oxyde de silicium. L'activité chimique n'est pas la même dans le silicium et dans l'oxyde, ce qui produit à l'équilibre une différence de concentration à l'interface Si-Si O₂. Cette différence est décrite par le coefficient de ségrégation

$$m_i = \frac{\text{Concentration de l'impureté } i \text{ dans Si}}{\text{Concentration de l'impureté } i \text{ dans Si O}_2}$$

Dans la pratique ce coefficient m dépend en particulier de l'orientation du réseau cristallin du silicium, de la température du process, de l'atmosphère ambiante (humide ou sèche). Pour donner un ordre de grandeur, m est plus grand que 1 (de l'ordre de 10) pour des impuretés telles que l'Arsenic et le phosphore et est inférieur à l'unité (~ 0.3) pour le bore.

1 - Presentation des problèmes

Par souci de simplicité, nous ne considéreront que le cas d'une seule impureté diffusante (comme dans le paragraphe I) ; bien entendu ce qui va être présenté ici peut s'étendre au cas de plusieurs impuretés diffusantes, de même que dans des situations tridimensionnelles.

La géométrie de la structure étudiée (idéalisée) est donnée sur la figure 69. Etant donné que les différents problèmes que nous allons envisager diffèrent surtout par les conditions aux limites, nous présentons les problèmes sous la forme usuelle d'équations aux dérivées partielles plutôt que sous forme variationnelle comme dans les chapitres précédents ; cependant c'est toujours la formulation faible qui sera utilisé pour les simulations numériques.

On notera Ω_1 la partie du domaine correspondant au silicium et Ω_2 , celle correspondant à l'oxyde.

De même on notera u la concentration de l'impureté diffusante dans le silicium et v la concentration de cette même impureté dans l'oxyde. Les équations de conservation s'écrivent :

$$(1.1) \quad \frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot (D_1(u) \nabla u) = 0 \quad \text{dans } \Omega_1 \times (0, T)$$

$$(1.2) \quad \frac{\partial v}{\partial t} - \varepsilon D_2 \Delta v = 0 \quad \text{dans } \Omega_2 \times (0, T)$$

ou $D_1(u)$ est le coefficient de diffusion de l'impureté dans le silicium,

εD_2 est le coefficient de diffusion de cette même impureté dans l'oxyde.

Nous avons volontairement introduit ε et D_2 . ε est un petit paramètre et D_2 est choisi du même ordre que D_1 (disons $D_1(0)$). En d'autres termes, la diffusion dans l'oxyde est linéaire et beaucoup plus lente que dans le silicium ($\varepsilon \sim 10^{-5}$).

Les équations (1.1) et (1.2) doivent être complétées par des conditions aux limites, des conditions de transmission à l'interface Si-SiO₂ (reperé par S sur la figure 69), et par des conditions initiales.

Nous pouvons alors définir les problèmes suivants :

Problème (p_ε) : trouver un couple $(u_\varepsilon, v_\varepsilon)$ satisfaisant les équations de continuité (1.1) (1.2) avec les conditions aux limites (se référer à la figure 69)

$$(BC)_1 \left\{ \begin{array}{ll} u = C_0 & \text{sur } \Gamma_1^h \\ u = 0 & \text{sur } \Gamma_1^f \\ v = C_0 & \text{sur } \Gamma_2^h \end{array} \right.$$

$$(BC)_2 \left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial u}{\partial n_1} = 0 & \text{sur } \Gamma_1^l \\ \frac{\partial v}{\partial n_2} = 0 & \text{sur } \Gamma_2^l \end{array} \right.$$

avec les conditions d'interface (ou de transmission)

$$(SC) \left\{ \begin{array}{ll} u = m v & \text{sur } S \\ D_1(u) \frac{\partial u}{\partial n_1} = - \varepsilon D_2 \frac{\partial v}{\partial n_2} & \text{sur } S \end{array} \right.$$

avec les conditions initiales

$$(IVC)_1 \left\{ \begin{array}{ll} u|_{t=0} = 0 & \text{dans } \Omega_1 \\ v|_{t=0} = 0 & \text{dans } \Omega_2 \end{array} \right.$$

Problème (Q_ϵ) : Trouver un couple (u_ϵ, v_ϵ) satisfaisant (1.1) et (1.2) avec les conditions aux limites $(BC)_2$ et

$$(BC)_3 \left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial u}{\partial n_1} = 0 & \text{sur } \Gamma_1^h \\ u = 0 & \text{sur } \Gamma_1^f \end{array} \right.$$

avec les conditions de transmission (SC) et avec les conditions initiales

$$(IVC)_2 \left\{ \begin{array}{ll} u|_{t=0} = 0 & \text{dans } \Omega_1 \\ v|_{t=0} = C_0 & \text{dans } \Omega_2 \end{array} \right.$$

On peut aussi donc envisager le problème (R_ϵ), analogue à (Q_ϵ) et dans lequel les conditions initiales correspondent à une distribution "quelconque" d'impuretés, c'est à dire

$$(IVC)_3 \left\{ \begin{array}{ll} u|_{t=0} = u_0 & \text{dans } \Omega_1 \\ v|_{t=0} = v_0 & \text{dans } \Omega_2 \end{array} \right.$$

Ces problèmes (P_ϵ), (Q_ϵ), (R_ϵ) correspondent à des étapes technologiques différentes dans la fabrication de circuit. Dans le problème (P_ϵ), les impuretés sont introduites dans le silicium et l'oxyde à partir de l'extérieur. Les impuretés entrent dans le silicium à travers Γ_1^h et dans l'oxyde à travers la frontière Γ_2^h , la concentration est maintenue à la valeur constante C_0 sur toute la frontière supérieure du dispositif. Ce problème (P_ϵ) permet de simuler le prédépôt d'impuretés.

Les conditions de transmission (SC) sont la conséquence des hypothèses de continuité du potentiel chimique et du flux d'impuretés (conduisant au phénomène de ségrégation). Pour ce problème particulier, cela conduit à une discontinuité au point X_c (voir figure 69).

Dans le problème (Q_ε) les impuretés sont initialement localisées dans le masque d'oxyde avec une concentration constante C_0 . L'oxyde joue le rôle d'un réservoir ; les impuretés entrent dans le silicium à travers l'interface S . C'est ce qui se passe aussi pour le problème (R_ε) , mais cette fois-ci on envisage une distribution d'impuretés quelconque dans les deux milieux pour l'état initial.

Dans tous les cas les conditions de Neumann homogènes $(BC)_2$ proviennent de la symétrie des données géométriques. En ce qui concerne la condition sur la frontière Γ_1^f , des indications ont déjà été données dans le paragraphe I.

Du point de vue théorique les problèmes (Q_ε) et (R_ε) sont plus faciles à étudier (voir [18]). Pour le problème (P_ε) la situation est plus compliquée à cause de la singularité en x_c . On peut cependant utiliser une procédure de "désingularisation" et montrer que ce problème possède aussi une et une seule solution.

2 - Approximation des problèmes

Nous suivons toujours la même procédure ; nous effectuons tout d'abord une semi-discretisation en temps à l'aide de la méthode des différences finies, conduisant aux schémas implicites ou de GEAR comme déjà exposé dans les précédents paragraphes. La méthode des éléments finis est alors utilisé pour l'approximation en espace.

Dans ce qui suit nous nous intéresserons plus particulièrement au schéma IMPLICITE (pour ne pas alourdir les formules), mais les différents résultats pourront aisément être reportés pour le schéma de GEAR.

Ainsi le problème (p_ε^n) (semi-discrétisé) pourra se formuler ainsi :

trouver un couple $(u_\varepsilon^{n+1}, v_\varepsilon^{n+1})$ satisfaisant

$$(2.1) \quad -\tau \nabla \cdot (D_1(u_\varepsilon^{n+1}) \nabla u_\varepsilon^{n+1}) + u_\varepsilon^{n+1} = u_\varepsilon^n \quad \text{dans } \Omega_1$$

$$(2.2) \quad -\tau \varepsilon D_2 \Delta v_\varepsilon^{n+1} + v_\varepsilon^{n+1} = v_\varepsilon^n \quad \text{dans } \Omega_2$$

avec les conditions $(BC)_1$, $(BC)_2$ et (SC)

De même pour les problèmes (Q_ε^n) ou (R_ε^n) on aura la formulation :

Trouver un couple $(u_\varepsilon^{n+1}, v_\varepsilon^{n+1})$ satisfaisant (2.1) et (2.3)
avec les conditions $(BC)_2$, $(BC)_3$ et (SC)

Il est relativement aisé d'obtenir existence et unicité dans des espaces fonctionnels adéquats des problèmes (Q_ε^n) et (R_ε^n) . Ce résultat est plus difficile à montrer pour le problèmes (P_ε^n) (voir [18])

Nous allons décrire maintenant une méthode dérivée des perturbations singulières pour traiter le problème (2.1) (2.2). Etant donné le rapport très important entre les coefficients de diffusion dans les 2 milieux, une approche directe peut conduire à des difficultés numériques.

3 - Résolution des problèmes par l'approche perturbations singulières

Pour des raisons de simplicité on n'exposera la technique que le cadre du problème continu (Q_ε^n), mais il est bien évident que l'on peut appliquer cette technique lorsque le problème est approché par la méthode des éléments finis (les mêmes éléments que dans les paragraphes précédents), de même que pour les autres problèmes (P_ε^n) et (R_ε^n).

Soit $\{u_\varepsilon, v_\varepsilon\}$ la solution du problème (Q_ε^n) (on omettra les indices n ou $(n+1)$ pour la solution). On introduit la série formelle.

$$(3.1) \quad U_\varepsilon = \{u_\varepsilon, v_\varepsilon\} = \frac{U^{(-1)}}{\varepsilon} + U^{(0)} + \varepsilon U^{(1)} + \varepsilon^2 U^{(2)} + \dots$$

où les fonctions inconnues $U^{(r)} = \{u^r, v^r\}$ sont assujetties à vérifier

$$(3.2) \quad U^{(r)} \in \tilde{W} \quad \forall r \geq -1$$

(\tilde{W} espace fonctionnel adéquat, lié aux conditions aux limites).

Puisqu'une singularité n'intervient que dans Ω_2 lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$ et par analogie à l'étude des problèmes linéaires raides [19] il semble raisonnable de supposer que

$$u^{-1} \equiv 0$$

Puis par identification des puissances de ε dans (3.1) on est conduit à la suite de problèmes suivants :

a) $U^{(-1)} = \{0, v^{-1}\}$, avec v^{-1} étant l'unique solution du problème

$$(3.3) \quad \left\{ \begin{array}{ll} -\tau \varepsilon D_2 \Delta v^{-1} + v^{-1} = \varepsilon v_\varepsilon^n & \text{dans } \Omega_2 \\ \frac{\partial v^{-1}}{\partial n_2} = 0 & \text{sur } \Gamma_2^h \cup \Gamma_2^l \\ v^{-1} = 0 & \text{sur } S \end{array} \right.$$

qui est un problème linéaire, bien posé dans Ω_2

b) $U^{(0)} = \{u^0, v^0\}$ est ensuite calculé de la façon suivante u^0 est d'abord solution du problème suivant

$$(3.4)_1 \left\{ \begin{array}{l} -\tau \nabla \cdot (D_1(u^0) \nabla u^0) + u^0 = u_\varepsilon^n \quad \text{dans } \Omega_1 \\ \frac{\partial u^0}{\partial n_1} = 0 \quad \text{sur } \Gamma_1^k \cup \Gamma_1^l ; \quad u^0 = 0 \quad \text{sur } \Gamma_1^f \\ D_1(u^0) \frac{\partial u^0}{\partial n_1} = -D_2 \frac{\partial v^{-1}}{\partial n_2} \quad \text{sur } S \end{array} \right.$$

Qui est le problème non linéaire de diffusion (classique) dans le silicium, la condition aux limites que l'on impose sur S (matérialisant l'interface Si-SiO₂) est une condition de flux (Neumann non homogène) calculée à l'aide de la solution précédente dans l'oxyde.

On calcule ensuite v⁰ dans Ω₂ comme solution du problème linéaire

$$(3.4)_2 \left\{ \begin{array}{l} -\tau \varepsilon D_2 \Delta v^0 + v^0 = 0 \quad \text{dans } \Omega_2 \\ \frac{\partial v^0}{\partial n_2} = 0 \quad \text{sur } \Gamma_2^k \cup \Gamma_2^l \\ v^0 = \frac{1}{m} u^0 \quad \text{sur } S \end{array} \right.$$

La condition aux limites qu'il faut prendre sur S est cette fois-ci une condition de Dirichlet non homogène. Si on poursuit dans l'identification, U¹ peut se calculer de la façon suivante

c) U⁽¹⁾ = {u¹, v¹}, avec u¹ solution du problème linéaire

$$(3.5)_1 \left\{ \begin{array}{l} -\tau \Delta (D_1(u^0) u^1) + u^1 = 0 \quad \text{dans } \Omega_1 \\ \frac{\partial u^1}{\partial n_1} = 0 \quad \text{sur } \Gamma_1^k \cup \Gamma_1^l , \quad u^1 = 0 \quad \text{sur } \Gamma_1^f \\ \frac{\partial}{\partial n_1} (D_1(u^0) u^1) = -D_2 \frac{\partial v^0}{\partial n_2} \quad \text{sur } S \end{array} \right.$$

et v¹ solution du problème

$$(3.5)_2 \left\{ \begin{array}{l} -\tau \varepsilon D_2 \Delta v^1 + v^1 = 0 \quad \text{dans } \Omega_2 \\ \frac{\partial v^1}{\partial n_2} = 0 \quad \text{sur } \Gamma_2^k \cup \Gamma_2^l \\ v^1 = \frac{1}{m} u^1 \quad \text{sur } S \end{array} \right.$$

et ainsi de suite.

Faisons quelques commentaires sur les problèmes intermédiaires. On peut tout d'abord remarquer que l'hypothèse u⁻¹ = 0 conduit à la détermination des fonctions U^r dans l'ordre suivant

$$v^{-1} \rightarrow u^0 \rightarrow v^0 \rightarrow u^1 \rightarrow v^1 \rightarrow u^2 \rightarrow \dots$$

De plus, "l'information" qui nous permet de calculer u^r à partir de v^{r-1} est donné par la dérivée normale $D_2 \frac{\partial v}{\partial n} r^{r-1}$ sur S (qui correspond à un flux normal d'impuretés) tandis que v^r dépend de $\frac{1}{2}$ la trace de u^r à l'interface (concentration d'impuretés sur S) par une condition de Dirichlet du type ségrégation.

Dans la pratique l'approche par les perturbations singulières a été menée jusqu'à l'ordre 0 ou 1 en ϵ . Si on se réfère aux problèmes linéaires "stiff" pour lesquels l'erreur due à la troncature au terme j dans le développement donné en (3.1), est bornée par ϵ^{j+1} , on peut espérer qu'une telle méthode donne des résultats acceptables numériquement en ne prenant que très peu de termes dans le développement en série, surtout dans le cas où le rapport des coefficients de diffusion (ϵ) dans les deux régions adjacentes est très petit. Une telle technique reste limitée lorsque les coefficients de diffusion sont du même ordre.

Une autre technique pour le traitement du phénomène de ségrégation, sans cette limitation relative aux ordres de grandeurs des coefficients de diffusion de deux milieux adjacents découle de la méthode de décomposition de domaines [20].

L'idée de la méthode est la suivante : connaissant les valeurs de concentration d'impuretés à l'interface S , on résout le problème de diffusion dans chaque sous domaine (silicium et oxyde), en considérant cette condition de Dirichlet à l'interface, puis les valeurs de la concentration d'impuretés sur S sont remises à jour de façon à réduire le flux global à l'interface, en vue de vérifier la condition $(SC)_b$. Cela peut-être mené à bien par une technique de gradient ; en combinant avec des méthodes de type relaxation ponctuelle on peut améliorer les performances d'une telle technique.

4 - Expériences numériques

De façon à pouvoir utiliser une méthode d'éléments finis analogue à celle décrite pour la diffusion dans le silicium, il est nécessaire d'avoir un maillage en triangles de l'oxyde de silicium. Nous avons représenté ce maillage sur la figure 70. Bien entendu les sommets sur l'interface $Si-SiO_2$ se correspondent deux à deux, de façon à obtenir une triangulation correcte pour le domaine complet $Si+SiO_2$. Deux stratégies sont possibles à ce niveau

- a) garder les deux maillages indépendants pour chaque sous domaines et repérer à l'aide de tableaux annexes la correspondance des noeuds sur l'interface $Si-SiO_2$
- b) recoller les deux triangulations de façon à obtenir un maillage global (c'est ce qui se fait habituellement pour les problèmes traités par éléments finis).

Il vaut mieux, à notre avis, choisir pour le problème de ségrégation, la stratégie a). En effet, par ce choix, il est beaucoup plus aisé (dans le logiciel)

de prendre en compte la discontinuité de la concentration à l'interface, car nous avons deux noeuds et donc deux valeurs possibles pour la concentration. Les équations sont ensuite "recollées" pour chaque noeud de l'interface.

Du point de vue essais numériques nous avons d'abord traité le problème (P_e) qui a permis en quelque sorte de vérifier que l'hypothèse faite dans les paragraphes précédents, à savoir que l'oxyde était un masque parfait pour la diffusion d'impuretés, était plausible. Dans des conditions semblables, les concentrations d'impuretés dans le silicium étaient identiques ("numériquement").

Nous avons aussi simulés le problème (Q_e) correspondant au problème de réservoir ; (diffusion par oxyde dopé).

Deux essais numériques ont été réalisés

a) nous avons pris de l'oxyde dopé en Arsenic, à la valeur uniforme 17.6 (correspondant à une concentration réelle de 10^{20} At/cm³). Le processus de diffusion s'est poursuivi pendant deux heures à 1000°C.

On peut voir sur la figure 71, la repartition des impuretés dans l'oxyde à la fin du process, et sur les figures 72 ou 73 la répartition d'Arsenic dans le silicium. Le coefficient m a été pris à 10, et l'on peut voir sur les résultats que la concentration d'Arsenic à l'interface S est de l'ordre 0.25 dans l'oxyde, et 2.5 dans le Si.

b) Nous avons choisi un oxyde plus fortement dopé 10^{21} At/cm³ (176.), et nous nous sommes placés dans les mêmes conditions que a).

La figure 74 donne la répartition d'Arsenic dans l'oxyde et la figure 75 la répartition des impuretés d'Arsenic qui ont pénétré dans le silicium.

Il y en a évidemment plus, mais la valeur maximum de la concentration dans le Si n'est pas multiplié par 10 par rapport au résultat de a).

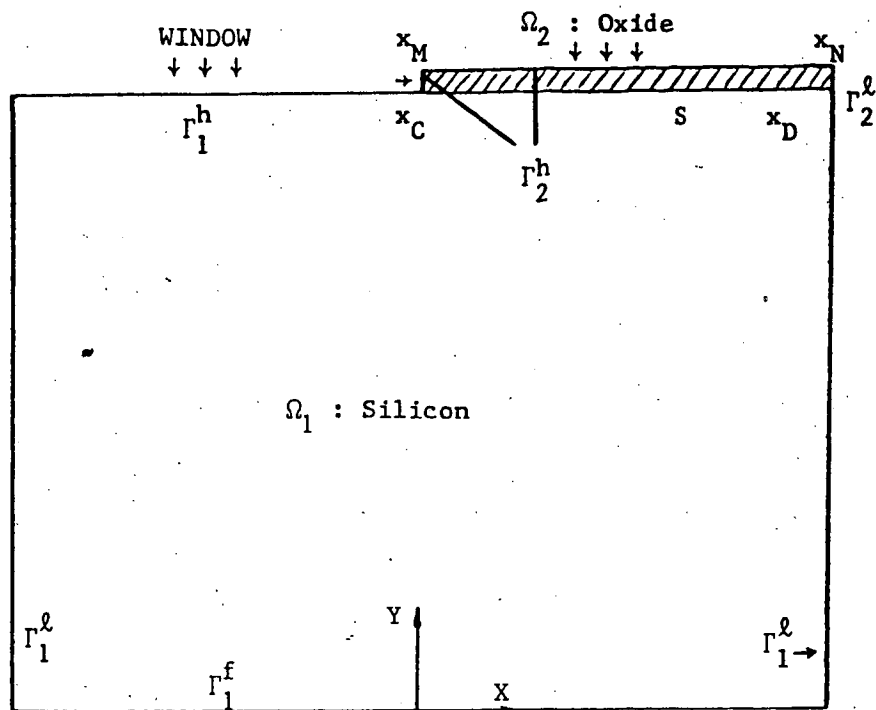


Fig 69. Domaine de Calcul (Simulation de la ségrégation)

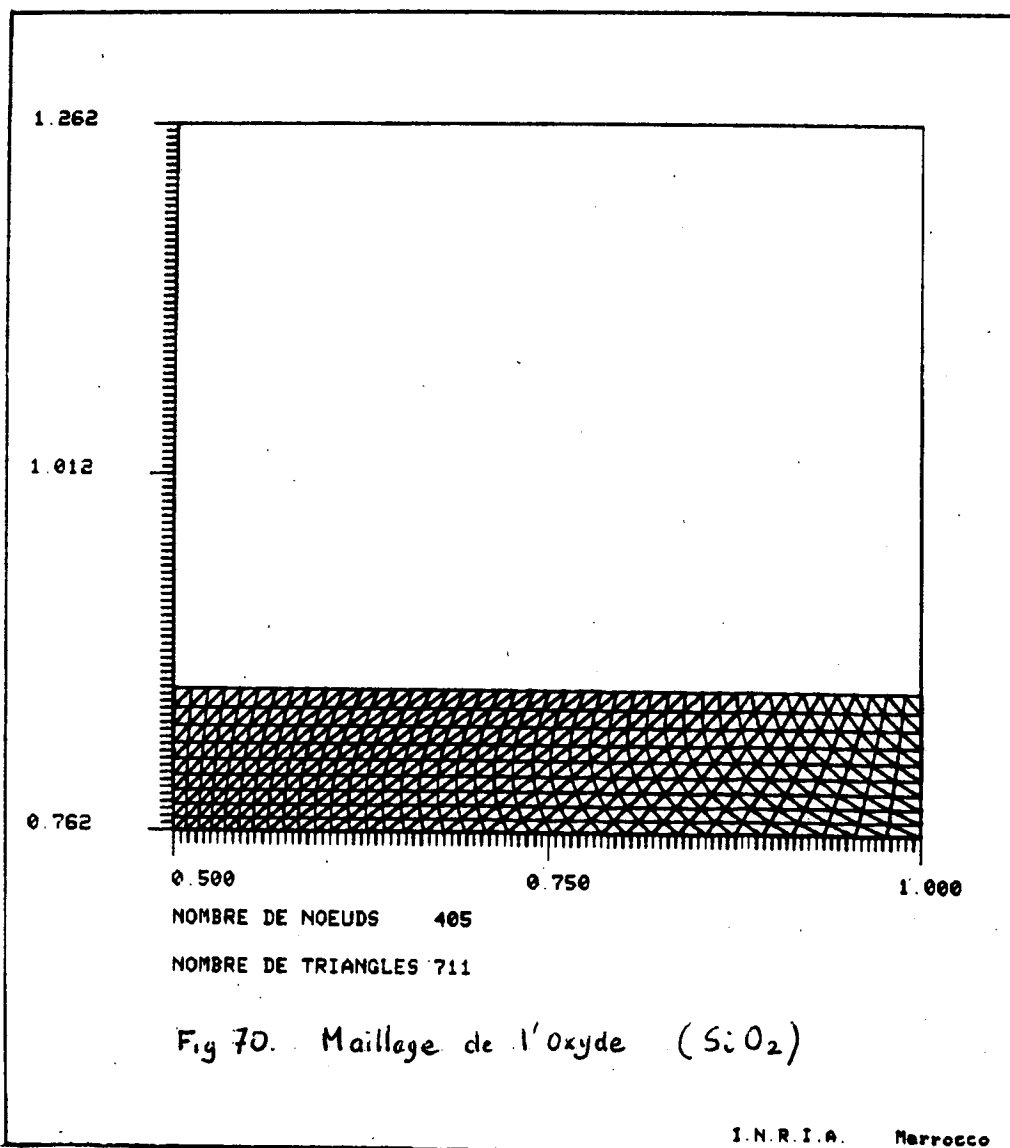


Fig 70. Maillage de l'oxyde (SiO_2)

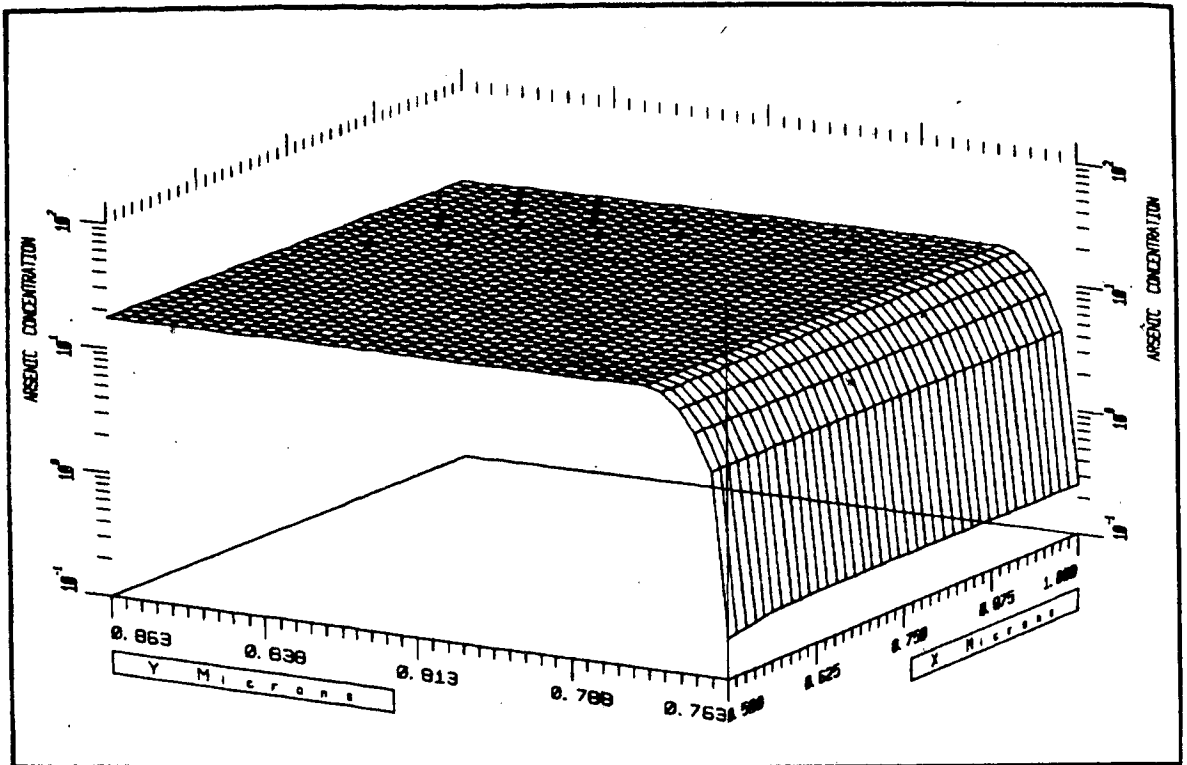


Fig: 71 SEGREGATION ARSENIC PLOT (Oxide)
 BORON DOPED SUBSTRAT $1E15 \text{ cm}^{-3}$ ($1.76E-4$)
 ARSENIC DOPED OXIDE $1E20 \text{ cm}^{-3}$ (17.6)
 PROCESS: 1000 Degrees 2 Hours

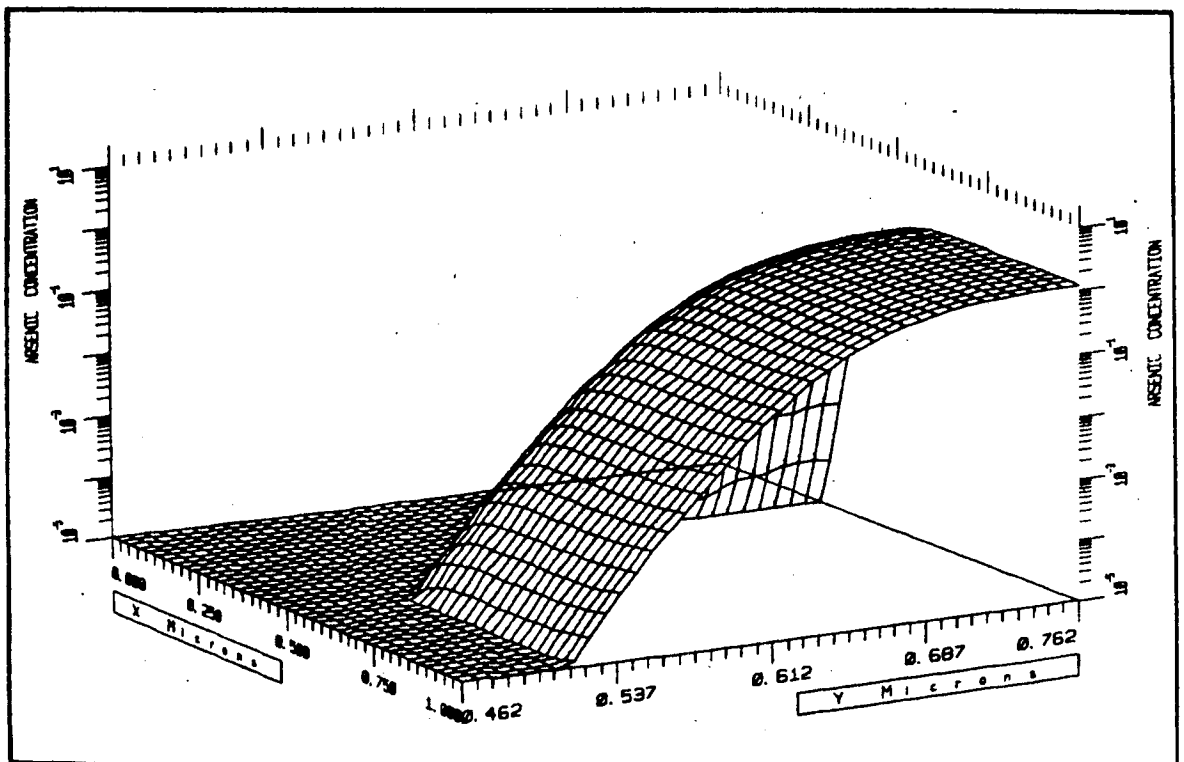


Fig: 72 SEGREGATION ARSENIC PLOT (Silicon)
 BORON DOPED SUBSTRAT $1E15 \text{ cm}^{-3}$ ($1.76E-4$)
 ARSENIC DOPED OXIDE $1E20 \text{ cm}^{-3}$ (17.6)
 PROCESS: 1000 Degrees 2 Hours

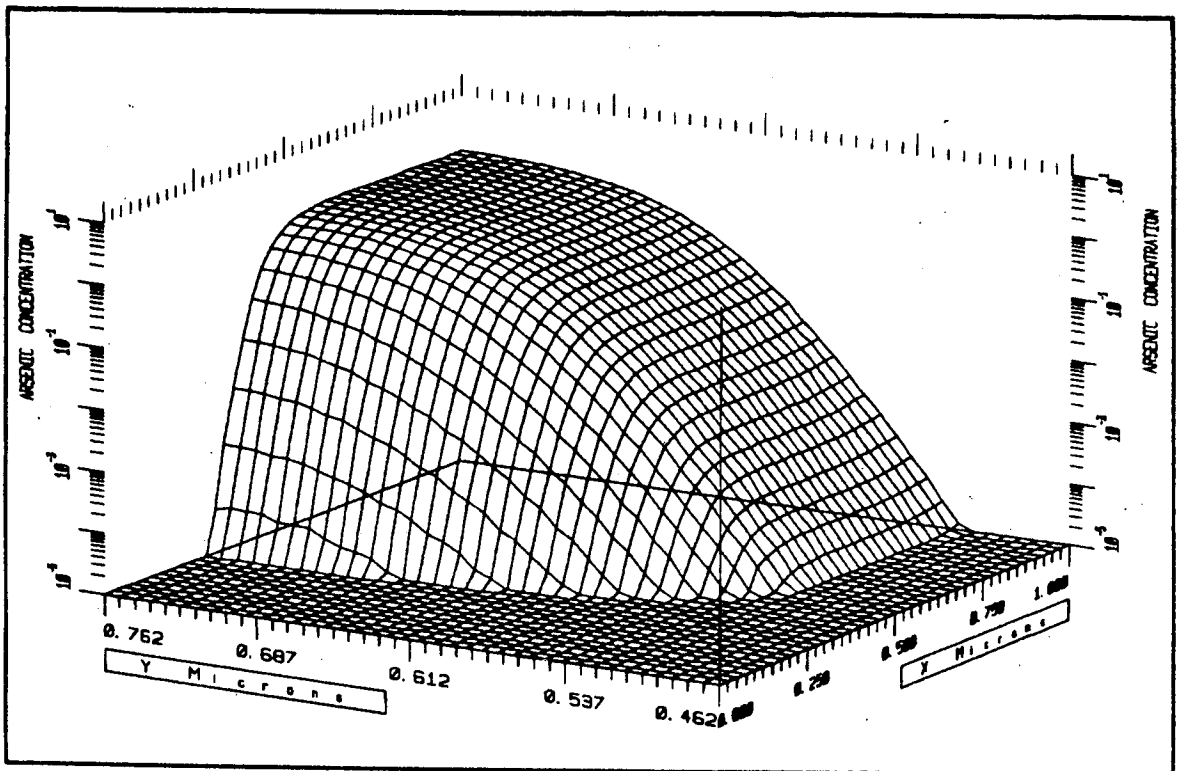


Fig: 73 SEGREGATION ARSENIC PLOT (Silicon)
 BORON DOPED SUBSTRAT $1E15 \text{ cm}^{-3}$ ($1.76E-4$)
 ARSENIC DOPED OXIDE $1E20 \text{ cm}^{-3}$ (17.6)
 PROCESS: 1000 Degrees 2 Hours

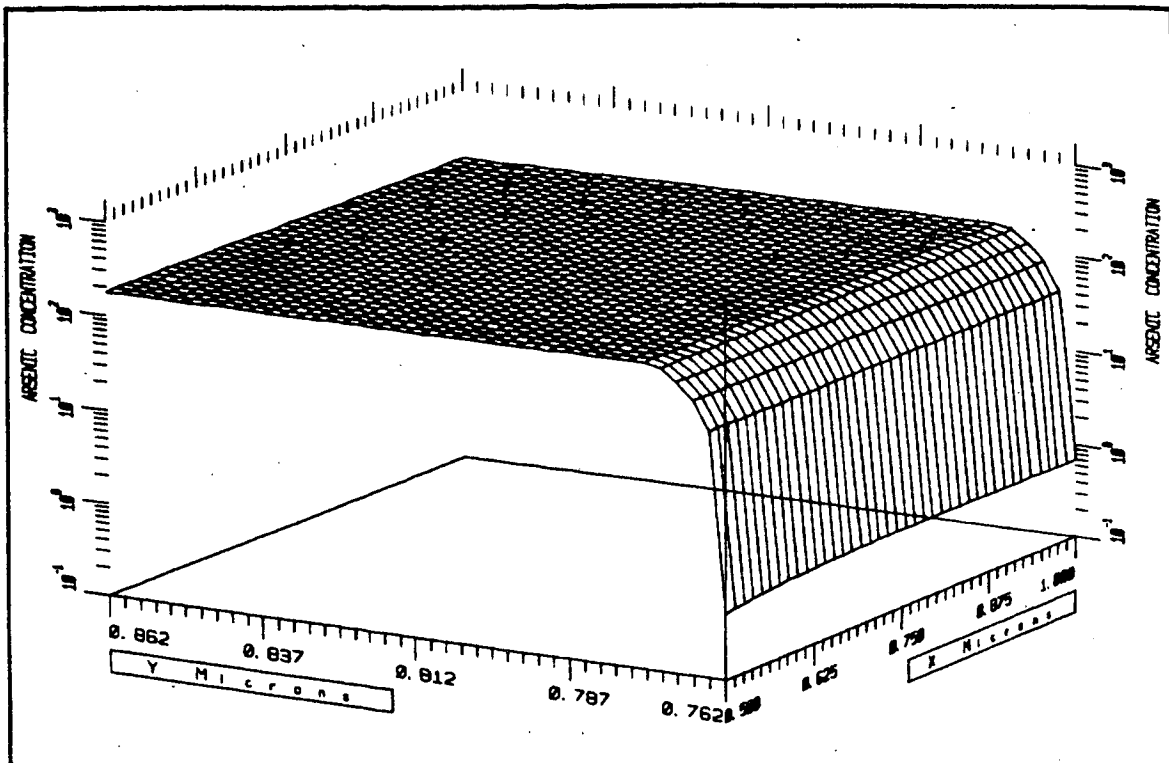


Fig: 74 SEGREGATION ARSENIC PLOT (Oxide)
 BORON DOPED SUBSTRAT $1E15 \text{ cm}^{-3}$ ($1.76E-4$)
 ARSENIC DOPED OXIDE $1E21 \text{ cm}^{-3}$ (176.)
 PROCESS: 1000 Degrees 2 Hours

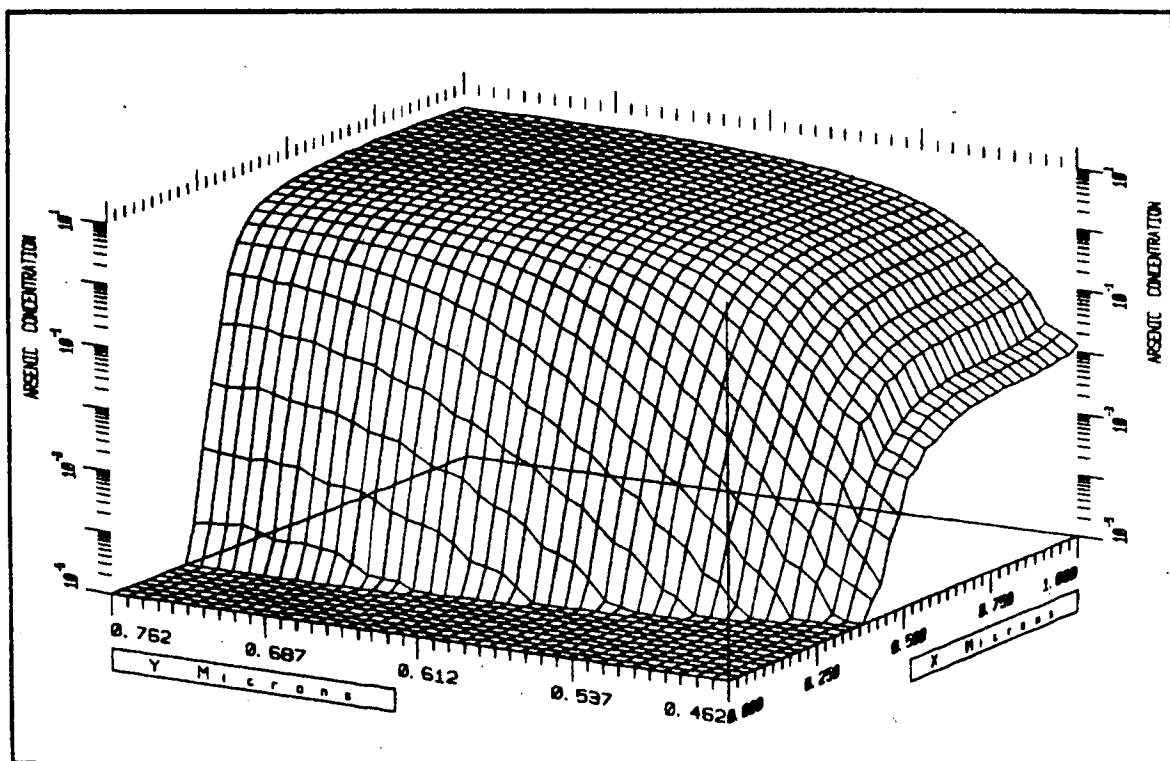


Fig: 75 SEGREGATION ARSENIC PLOT (Silicon)
 BORON DOPED SUBSTRAT $1E15 \text{ cm}^{-3}$ ($1.76E-4$)
 ARSENIC DOPED OXIDE $1E21 \text{ cm}^{-3}$ (176.)
 PROCESS: 1000 Degrees 2 Hours

IV DIFFUSION D IMPURETES DURANT L OXYDATION

On reprend ici le texte d'un article présenté au 6ème Colloque International sur les méthodes de calcul scientifique et technique qui s'est tenu à Versailles en décembre 1983 (co-auteurs A.Gerodolle et S.Martin du CNET-CNS). On a ajouté ici quelques figures.

1. INTRODUCTION

Nous présentons dans cet article une méthode numérique permettant de simuler la diffusion d'impuretés dans du silicium, ce dernier subissant en plus une oxydation par une partie de sa surface (LOCOS process). L'étude et les résultats présentés ici sont la suite de précédents travaux exposés dans [15], [21], et dans lesquels on étudiait des algorithmes numériques permettant de résoudre le problème non linéaire lié à la diffusion d'une impureté dans du silicium et puis le couplage entre plusieurs impuretés ainsi que le phénomène de ségrégation (discontinuité des concentrations) se produisant à l'interface Silicium-Oxyde de Silicium ($S_i-S_iO_2$). L'oxydation, (phénomène très important intervenant lors de la fabrication de circuits intégrés), n'avait pas encore été considérée, du point de vue numérique, par les auteurs. L'oxydation modifie la géométrie du silicium (dans lequel se produit aussi la diffusion) conduisant donc à des problèmes délicats du point de vue numérique. Les processus d'oxydation et de diffusion sont liés mais si l'on tient compte du fait que la cinétique de la ségrégation est plus rapide que celle de l'oxydation, on peut en quelque sorte (et pour une première approche), découpler les deux phénomènes.

Plusieurs approches dans la modélisation de ce phénomène sont possibles et la plus utilisée [16], [22], [23], est celle qui consiste à ramener le domaine physique étudié (le silicium), à un domaine fixé. Ce procédé nécessite de connaître explicitement et analytiquement la loi de croissance de l'oxyde ; cette loi, dont l'expression varie selon les auteurs, est ajustée expérimentalement et se présente en général sous la forme $y = f(x,t)$ (famille de fonctions dépendant du temps t). On effectue donc un changement de coordonnées ramenant le domaine variable à un domaine fixé. Les équations de diffusion sont évidemment changées et il apparaît un terme de transport.

Nous avons choisi dans cette étude de travailler dans le plan physique, c'est à dire avec un domaine variable (ce domaine variable, sera, évidemment le silicium car c'est la partie du transistor qui nous intéresse). L'oxydation et la ségrégation sont modélisés par un flux à l'interface $S_i-S_iO_2$ pouvant être entrant ou sortant, selon l'impureté considérée. Dans ce cas on n'a plus besoin de connaître explicitement la loi d'avancée de l'oxyde dans le silicium ; ce qui interviendra dans la formulation, ce sont les déplacements que subissent les points de la frontière du silicium dans un laps de temps donné (correspondant au pas de discrétisation en temps). Ces déplacements pourront parvenir, par exemple d'un module extérieur, simulant la croissance de l'oxyde à l'aide de la diffusion de l'oxygène dans l'oxyde [24] [25].

Pour les essais numériques présentés ici, nous nous sommes donné une loi d'avancée de l'interface $S_i-S_iO_2$ du type de celle utilisée dans [16], [21], [23] et nous calculons des déplacements à partir de cette loi. L'approximation numérique est faite par la méthode des éléments finis P1 en espace et par un schéma implicite en temps. Les problèmes non linéaires, à chaque pas de temps, sont résolus par des algorithmes

déjà exposés dans [15], [21].

2. MODELE PHYSIQUE

L'utilisation de couches d'oxyde trouve plusieurs applications dans la fabrication des circuits intégrés : elles servent de masques pendant l'implantation et la diffusion des impuretés ; elles permettent également de passiver un circuit en protégeant la surface du silicium contre la plupart des espèces contaminantes. Le diélectrique isolant la grille d'un transistor à effet de champ est constitué d'un oxyde formé à haute température. Dans les structures VLSI, les couches d'oxyde sont utilisées pour former des régions isolées électriquement, dont les frontières sont définies par une zone d'oxyde thermique qui s'est formée en pénétrant complètement le substrat de silicium. Dans ce qui suit, nous nous intéressons à cet aspect (procédé "Semi-Rox"), qui est très important dans la simulation des étapes de fabrication.

Afin d'obtenir une modélisation de la croissance d'oxydes thermiques, les phénomènes physiques suivants devront être pris en compte :

a- formation de l'oxyde

L'oxyde se forme par la combinaison d'une molécule d'oxygène qui, ayant traversé la couche d'oxyde, réagit avec le silicium pour former une molécule de dioxyde de silicium, suivant la réaction



La réaction mettant en jeu de la vapeur d'eau est quelque peu plus compliquée :



L'hydrogène est libéré au niveau de l'interface Silicium-oxyde et diffuse rapidement.

La cinétique de cette réaction a été présentée par Deal et Grove [26], dont le résultat des travaux est la loi unidimensionnelle bien connue :

$$(3) \quad Z(t)^2 + A.Z(t) = B.(t+\tau)$$

ou $Z(t)$ est l'épaisseur d'oxyde à l'instant t , A et B sont les coefficients linéaire et parabolique, et τ un temps exprimant la condition initiale de l'oxyde déjà formé. C'est cette loi qui sera utilisée pour les expériences numériques présentées ici ; elle caractérisera la croissance d'oxyde dans la direction perpendiculaire à la surface de l'oxyde et assez loin du masque de nitrure.

Dans le procédé "Semi-Rox", la forme de la frontière Si-SiO_2 peut-être assez bien décrite par une fonction du type erfc avec comme paramètre essentiel l'extension latérale. Une dépendance entre ce paramètre et les paramètres technologiques du procédé a été proposée dans [27].

b- Diffusion des impuretés

Pendant la croissance de l'oxyde thermique, les impuretés vont diffuser dans le silicium et dans l'oxyde.

Le problème de diffusion a déjà été résolu lors de la simulation des étapes de pré-déposition ou de redistribution en ambiance inerte. Les résultats ont fait l'objet de publications [15], [21], pour la diffusion simple tout d'abord puis pour la diffusion couplée. Les lois de diffusion des dopants (tels que l'Arsenic, le Bore, le Phosphore) sont celles déjà décrites dans [15][21] ; elles tiennent compte dans le silicium de l'action du champ électrique interne ; de la concentration de l'impureté, du phénomène de clustering.

Si $\vec{J}_i(C_j)$ est le flux de l'impureté i dans le domaine Ω , la loi de conservation

pour l'impureté s'écrit :

$$(4) \quad \frac{\partial C_i}{\partial t} = - \operatorname{div} \vec{J}_i [C_j]$$

(si on suppose qu'il n'y a pas de sources d'impureté i à l'intérieur du domaine). La loi décrite par (4) est non linéaire dans le silicium et inéaire dans l'oxyde (coefficient de diffusion constant).

c- Ségrégation

L'activité chimique n'est pas la même dans le silicium et dans l'oxyde, ce qui produit à l'équilibre une différence à l'interface $S_i-S_iO_2$, décrite par le coefficient de ségrégation

$$m_i = \frac{\text{Concentration de l'impureté } i \text{ dans le silicium}}{\text{Concentration de l'impureté } i \text{ dans l'oxyde}}$$

Quand $m < 1$, la concentration d'équilibre de l'impureté dans l'oxyde est plus élevée que celle dans le silicium, et l'oxyde tend à appauvrir le silicium en impuretés. C'est le cas pour le Bore. Au contraire lorsque $m > 1$ et que l'oxyde croît en consommant le silicium, un accroissement de la concentration de surface peut avoir lieu si la diffusion de l'impureté dans l'oxyde est lente. C'est le cas du phosphore. Afin de fournir des valeurs numériques aux m_i , on se reportera aux travaux du R.B. Fair et J.C.C. Tsai [28], qui montrent la dépendance de m_i avec l'orientation du réseau, la température, l'atmosphère ambiante.

Il est intéressant de remarquer qu'il y a redistribution effective des impuretés pendant une oxydation même si $m = 1$, parce que le volume de la couche d'oxyde est environ 2,2 fois plus grand que celui du silicium consommé pour la former.

Les propriétés physiques décrites ici seront suffisantes pour le sujet auquel nous nous intéressons, qui est de proposer une méthode numérique permettant de simuler la diffusion couplée d'impuretés dans un domaine se déformant au cours du temps. En effet nous ne simulerons que ce qui se passe dans le silicium et donc la loi de conservation, tenant compte de la croissance d'oxyde et du phénomène de ségrégation peut se traduire par une condition de flux à l'interface $S_i-S_iO_2$

$$(5) \quad \vec{J}_i \cdot \vec{n} = (1 - \alpha h_i) C_{Si,i} \vec{V}_{ox} \cdot \vec{n}$$

où \vec{n} est la normale à l'interface $S_i-S_iO_2$

\vec{V}_{ox} est la vitesse d'avancée de l'interface

α est le coefficient de dilatation entre oxyde et silicium

$C_{Si,i}$ est la concentration en impuretés i , dans le silicium

h_i est l'inverse du coefficient de ségrégation ($C_{ox,i} = h_i C_{Si,i}$).

Pour les essais numériques on prendra $\alpha = 1/0.44$, $h = 0.1$ pour l'Arsenic ou le phosphore et $h = 3.3$ pour le bore.

Sur les autres parties de la frontière du silicium, on considère des conditions plus classiques de type flux nul ou concentration donnée.

3 PRESENTATION DES PROBLEMES CONTINUS ET DISCRETS

On se donne un domaine $\Omega(0)$ représentant le silicium à l'instant initial et l'on veut résoudre les équations de diffusion non linéaires dans le domaine $\Omega(t)$

$$(6) \quad \frac{\partial C_i}{\partial t} = \operatorname{div} \vec{J}_i [C_j] \quad \text{dans } \Omega(t)$$

ou \vec{J}_i , flux de l'impureté i , peut être donné par

$$(7) \quad \vec{J}_i [[C_j]] = -D_i \left\{ \vec{\nabla} C_i \left(1 + \frac{z_i^2 C_i}{\sqrt{(\sum_j C_j z_j)^2 + 4n_i^2}} \right) + \sum_{j \neq i} \vec{\nabla} C_j \frac{Z_i C_i Z_j}{\sqrt{(\sum_j C_j z_j)^2 + 4n_i^2}} \right\}$$

D_i pouvant aussi dépendre des concentrations C_j ; z_j étant la charge de l'impureté j (± 1), n_i étant la concentration intrinsèque à la température considérée.

Les conditions aux limites sont données par

$$(8-a) \quad \vec{J}_i \cdot \vec{n} = (1 - \alpha_i) C_i V_{ox} \cdot \vec{n} \quad \text{à l'interface } S_i - S_i O_2$$

(c'est à dire sur une partie de la frontière de Ω)

$$(8-b) \quad \vec{J}_i \cdot \vec{n} = 0 \quad \text{ailleurs (par exemple)}$$

On se donne aussi des concentrations initiales d'impuretés dans $\Omega(0)$, V_{ox} décrivant l'avancée de l'interface $S_i - S_i O_2$ au cours du temps et définissant par la même $\Omega(t)$, et est ici considéré comme une donnée.

La condition aux limites (8-a) est une condition classique de type Fourier mais appliquée à une frontière mobile.

Notons que l'on retrouve comme cas particulier lorsque $V_{ox} = 0$ dans (8-a), la formulation de redistribution d'impuretés en ambiance inerte (problème traité dans [24]), le domaine étant dans ce cas fixe évidemment. La différence avec le problème de diffusion couplée en ambiance inerte apparaît donc seulement par la condition aux limites (8-a) (entraînant implicitement la variation du domaine de calcul Ω). En fait cela entraîne des difficultés pratiques pour le problème discret.

On s'est fixé pour but de réaliser un logiciel de simulation de la diffusion couplée d'impuretés dans du silicium, lorsque celui-ci subit en plus une oxydation localisée et cela en utilisant l'approche discrète décrite dans les précédents travaux [45] [24], c'est à dire une discrétisation en temps par un schéma IMPLICITE ou de GEAR et une discrétisation à l'aide des éléments finis P1 en espace, de façon à utiliser au mieux les algorithmes déjà développés.

Nous allons donc travailler dans le plan physique c'est à dire avec un domaine Ω variable et donc pour le problème discret on considérera une suite de domaines $\Omega_{h,n}$ et évidemment une suite de maillages $\mathcal{T}_{h,n}$ (triangulations).

Dans cet article nous ne considérons que le schéma implicite en temps, le schéma de GEAR pouvant constituer une extension (non immédiate) du présent travail.

Pour la simulation numérique ; nous écrivons une formulation variationnelle du problème (6), (8a,8b) en essayant d'adapter la condition (8a) au cas discret. Peut être aurait-il mieux valu formuler la condition de conservation directement sur le problème discret lui-même. Le schéma en temps implicite fourni la solution au temps $(n+1)$ connaissant celle-ci au temps n .

La formulation variationnelle du problème de diffusion sera écrite sur le domaine $\Omega_{h,n+1}$ (c'est à dire au temps $(n+1)$). Ainsi un élément de l'espace discret approximant l'espace fonctionnel dans lequel on cherche les concentrations peut s'écrire :

$$(9) \quad C = \sum_k C_k w_k$$

où $\{w_k\}$ est la base classique pour les éléments finis P1, et C_k représentant les valeurs de la concentration de l'impureté considéré aux noeuds de la triangulation.

La dérivée en temps dans (6) approché selon le schéma implicite s'exprime par

$$(10) \quad \frac{\partial C}{\partial t} \sim \frac{C^{n+1} - C^n}{\tau_n} = \frac{1}{\tau_n} \sum_k \left[C_k^{n+1} w_k^{n+1} - C_k^n w_k^n \right]$$

Maintenant si nous considérons que le maillage au temps $(n+1)$ est obtenu par déformation du maillage au temps n , (autrement dit nous conservons le même nombre de noeuds, le même nombre de triangles et la même topologie) alors on pourra écrire (10) de la façon suivante

$$(11) \quad \frac{\partial C}{\partial t} \sim \frac{1}{\tau_n} \left[\sum_k (C_k^{n+1} - C_k^n) w_k^{n+1} + \sum_k C_k^n (w_k^{n+1} - w_k^n) \right]$$

Dans (11) on retrouve le terme classique d'approximation de la dérivée en temps pour le schéma implicite lorsque le domaine est fixe (1er terme) ; le deuxième terme nous donne la modification à apporter du fait du domaine variable (approximation de la dérivée en temps des fonctions de base w_k).

Si on considère que les déplacements des fonctions de base sont suffisamment petit on pourrait exprimer (comme dans []) le terme $w_k^{n+1} - w_k^n$ par l'expression suivante

$$w_k^{n+1}(x) - w_k^n(x) = - w_i(x) \nabla w_k \cdot \alpha_i + o(\alpha_i)$$

pour $x \in T_j^n \cap T_j^{n+1}$, $\forall i$ et j tels que $x_i, x_k \in T_j$

Si la triangulation $\mathcal{T}_{h,n+1}$ est obtenue en déplaçant le noeud x_i de $\mathcal{T}_{h,n}$ de x_i à $x_i + \alpha_i$.

On retrouve alors une formulation faisant intervenir un terme du premier ordre (convection), mais en fait dans la suite nous considérons l'expression telle que formulée en (11).

L'interprétation discrète de la condition de flux (8-a) conduirait à une intégration sur le domaine compris entre Γ^n et Γ^{n+1} [Γ^n étant la frontière de Ω^n (instant n)] ; cette intégrale est en fait approchée [et c'est par cela qu'on se rapproche de la formulation de la condition de flux (8-a) à l'interface $S_i - S_{iO_2}$], par une intégrale calculée sur Γ^n ou Γ^{n+1} , mais en ne perdant pas de vue que c'est une intégrale des concentrations entre Γ^n et Γ^{n+1} que l'on veut évaluer. Aussi en analysant le cas unidimensionnel fig. 76 et 77, le flux d'impuretés pourra être calculé approché par (notation des figures)

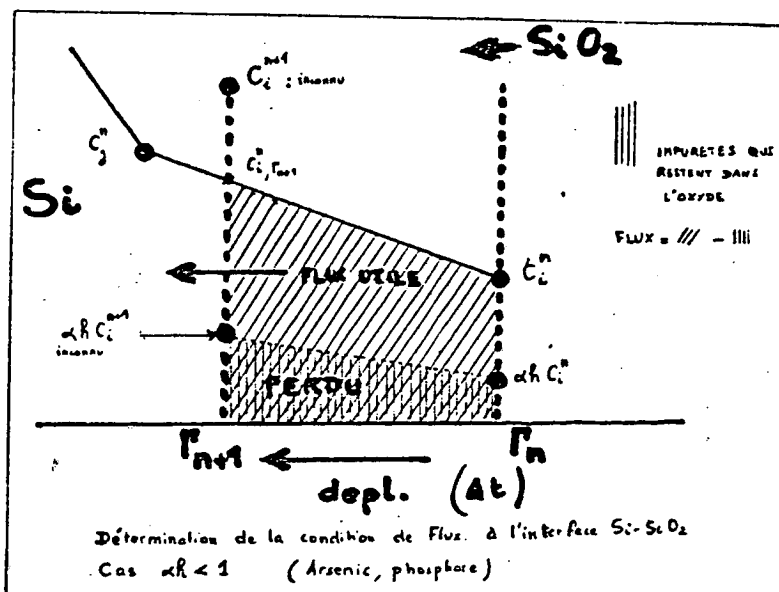


Fig. 76 : Evaluation du flux dans le problème discrétisé (cas $\alpha h < 1$ - flux entrant)

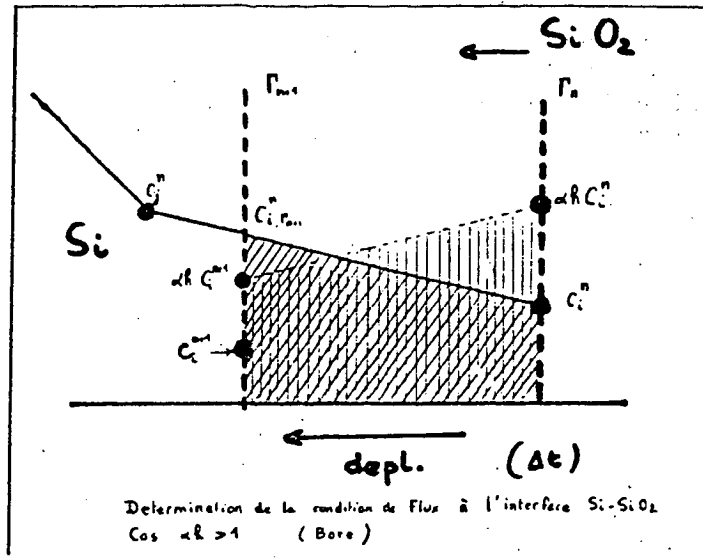


Fig. 77 : Evaluation du flux dans le problème discrétisé (cas $\alpha h > 1$ - flux sortant)

$$(12) \quad \left[\frac{c_{\Gamma n+1}^n + c_{\Gamma n}^n}{2} \right] \times \vec{\text{depl}} - \alpha h \left[\frac{c_{\Gamma n+1}^{n+1} + c_{\Gamma n}^n}{2} \right] \times \vec{\text{depl}}$$

Dans (12) on a évidemment

$$(13) \quad \vec{\text{depl}} = \vec{V}_{\text{ox}} * \tau$$

Le premier terme dans (12) exprime en quelque sorte le flux qu'il faudrait imposer à l'interface mobile pour que toutes les impuretés soient conservées dans le silicium, le second correspondant à la "perte" due à la ségrégation (h) et à la croissance d'oxyde (α).

C'est la formule analogue à (12) que nous utilisons pour le problème bidimensionnel.

On obtient finalement la formulation variationnelle suivante (écrite pour le cas d'une impureté pour simplifier les notations).

Connaissant c^n sur Ω^n , on calcule c^{n+1} sur Ω^{n+1} en résolvant le problème non linéaire.

$$\begin{aligned}
 (14) \quad & \int_{\Omega^{n+1}} c^{n+1} \cdot w_i^{n+1} dx + \tau \int_{\Omega^{n+1}} D(c^{n+1}) \nabla c^{n+1} \cdot \nabla w_i^{n+1} dx \\
 & + \int_{\Gamma_{n+1}^{int}} \frac{\alpha h}{2} (-\vec{\text{dép}} \cdot \vec{n}) c^{n+1} \cdot w_i^{n+1} d\Gamma = \int_{\Omega^{n+1}} \tilde{c}^n \cdot w_i^{n+1} dx \\
 & - \int_{\Omega^{n+1}} (\tilde{c}^n - c^n) \cdot w_i^{n+1} dx - \int_{\Gamma_n^{int}} \vec{\text{dép}} \cdot \vec{n} \left[\frac{c_{\Gamma^{n+1}}^n + c^n}{2} \right] w_i^n d\Gamma \\
 & + \int_{\Gamma_n^{int}} \frac{\alpha h}{2} (\vec{\text{dép}} \cdot \vec{n}) c^n \cdot w_i^n d\Gamma
 \end{aligned}$$

pour $i = 1, 2, \dots, N$

Dans (14) le déplacement ($\vec{\text{dép}}$) pour le pas de temps τ est donné par (13) et

$$\begin{aligned}
 (15) \quad & \tilde{c}^n = \sum_k c_k^n w_k^{n+1}, \\
 & \text{et } \Gamma_n^{int} \text{ représente l'interface } S_i - S_i \cup_2.
 \end{aligned}$$

Dans le second membre de (14) certains termes peuvent évidemment être regroupés de même que les intégrales sur Γ_n peuvent aussi s'exprimer en intégrales sur Γ_{n+1} , mais il nous a semblé que l'expression du Γ_n était plus naturelle. On retrouve évidemment comme cas particulier le cas où le domaine est fixé ; pour chaque pas de temps nous avons un problème de diffusion avec une condition aux limites du type Fourier et où le second membre comprend outre le terme classique $\int_{\Omega^{n+1}} \tilde{c}^n w_i^{n+1} dx$, les différents termes suivants :

$$\begin{aligned}
 (16) \quad & - \int_{\Omega^{n+1}} (\tilde{c}^n - c^n) \cdot w_i^{n+1} dx \\
 & \text{lié à la variation du maillage dans } \Omega^{n+1},
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (17) \quad & - \int_{\Gamma_n^{int}} \vec{\text{dép}} \cdot \vec{n} \left(\frac{c_{\Gamma^{n+1}}^n + c^n}{2} \right) w_i^n d\Gamma \\
 & \text{lié au flux causé par la déformation du domaine } \Omega,
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (18) \quad & + \int_{\Gamma_n^{int}} \frac{\alpha h}{2} (\vec{\text{dép}} \cdot \vec{n}) \cdot c^n \cdot w_i^n d\Gamma
 \end{aligned}$$

qui avec le terme analogue du 1er membre est lié à la ségrégation et à la croissance en volume due à l'oxydation.

Des variantes de formulation sont possibles, par exemple en remplaçant (17) par

$$\begin{aligned}
 (19) \quad & - \int_{\Gamma_{n+1}^{int}} (\vec{\text{dép}} \cdot \vec{n}) \left[\frac{c^{n+1}}{2} \right] w_i^{n+1} d\Gamma - \int_{\Gamma_n^{int}} \vec{\text{dép}} \cdot \vec{n} \left[\frac{c^n}{2} \right] w_i^n d\Gamma
 \end{aligned}$$

Le premier terme passant alors au premier membre. Alors que la formulation (14) ne pose jamais de problèmes de résolution la formulation avec (19) risque de poser un problème dans le cas où $h < 1$, pour des vitesses d'avancée de l'interface suffisamment grandes.

4 DEFORMATION DE MAILLAGE

Durant l'oxydation, le silicium (Ω) change de forme. Puisque l'on veut simuler le phénomène dans le S_i , à l'aide des éléments finis, il faut avant tout disposer d'un maillage sur Ω (plus précisément d'une triangulation, car on utilise les éléments finis P1). Différentes solutions sont envisageables à ce niveau ; nous avons retenu celle qui consiste à déformer une triangulation existante, en gardant la même topologie.

Etant donné une triangulation Ω , on se donne donc les déplacements pour les noeuds appartenant à la frontière de Ω , et l'on veut calculer les déplacements à imposer aux noeuds internes de façon à obtenir un nouveau maillage qui soit topologiquement correct (pas de chevauchement ou retournement de triangles). Un tel problème pourrait être formulé et résolu comme un problème d'élasticité classique 2D par exemple (en formulation déplacement sur le domaine existant) et d'ailleurs des essais numériques en ce sens ont été faits avec le logiciel MODULEF. Mais il ne faut pas oublier que cela doit être répété à chaque pas de temps du processus de diffusion et donc risque de devenir prohibitif du point de vue temps de calcul.

On peut aussi penser à extrapoler pour un maillage de type éléments finis une méthode itérative donnée par A.A. AMSDEN et C.W. HIRT (Journal of Computational Physics 11, 348-359, 1973), mais cela ne semble facile à utiliser que lorsque les domaines considérés sont convexes, ce qui n'est malheureusement pas le cas pour nous.

Nous avons donc élaboré une méthode que nous pensons suffisamment robuste, (du moins pour les cas qui nous intéressent : oxydation du silicium), et qui s'apparente peut-être à une formulation de type éléments frontière pour un problème d'élasticité. Décrivons maintenant cette méthode (d'ailleurs immédiatement généralisable pour un maillage tridimensionnel).

Soit \mathcal{H} l'ensemble des noeuds frontières et soit \vec{D}_k , $k \in \mathcal{H}$ le déplacement imposé (connu) au noeud k , w_k est un poids que l'on affecte au déplacement de ce noeud k (c'est par exemple pour le cas bi-dimensionnel, la somme des longueurs des segments frontières de part et d'autre du noeud k).

Le déplacement d'un noeud intérieur i est alors calculé par

$$(20) \quad \vec{D}_i = \frac{1}{\alpha_i} \sum_{k \in \mathcal{H}} w_k \alpha_{ki} \vec{D}_k$$

α_{ki} étant en quelque sorte un facteur d'influence

$$(21) \quad \alpha_{ki} = \frac{1}{d_{ki}^\beta}$$

d_{ki} étant la distance du noeud i au noeud k , β étant un paramètre qui d'après les essais numériques semble lié à la "dureté" du maillage.

On a remarqué qu'il fallait prendre $\beta \geq 2$, sinon les déplacements avaient l'air de mal se "propager" à l'intérieur conduisant rapidement à des retournements de triangles. Pour les essais numériques nous avons pris $\beta = 4$.

Dans (20) α_i est un facteur de normalisation et vaut naturellement

$$(22) \quad \alpha_i = \sum_{k \in \mathcal{H}} \alpha_{ki} w_k$$

- Mise en oeuvre

Pour mettre en oeuvre cette technique de déformation de maillage il faut donc connaître les déplacements de chaque noeud appartenant à l'interface $S_i-S_iO_2$.

Rappelons que ce déplacement peut avoir été calculé par un module qui simule la croissance de l'oxyde à l'aide de la diffusion de l'oxygène dans cet oxyde.

Cependant pour les résultats numériques présentés ici nous nous sommes donnés analytiquement la loi de croissance d'oxyde analogue à celle couramment utilisée par d'autres auteurs [16], [22], [23].

La fonction décrivant l'avancée de l'oxyde dans le silicium est modélisée par :

$$(23) \quad U(x,t) = U_0 + \left[\frac{U(t)-U_0}{2} \right] \operatorname{erfc} \left(\frac{x-a + \delta [U(t) - U_0]}{\sqrt{2} R_0 U(t)} \right)$$

où R_0 est le rapport entre la vitesse latérale et la vitesse verticale d'avancée de la frontière, δ est un paramètre qui comme R_0 dépend de la technologie utilisée, a est l'abscisse du bord du masque de nitrure (barrière pour l'oxygène), U_0 est l'épaisseur initiale d'oxyde.

$U(t)$ est la fonction donnant la loi unidimensionnelle de croissance de l'oxyde [24], (loi de type parabolique) et erfc est la fonction erreur complémentaire donnée par :

$$(24) \quad \operatorname{erfc}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^{\infty} e^{-t^2} dt$$

La mise en oeuvre pratique se réalise de la façon suivante : on part de la configuration à l'instant n , on calcule la position du nouvel interface à l'instant $(n+1)$ par (23), on redistribue les noeuds de l'interface à l'instant précédent sur ce nouvel interface et on en déduit des déplacements, on se trouve donc dans les conditions d'application de la formule (20).

Remarque.

La loi (23) donne la loi de croissance de l'oxyde et non la loi d'avancée de l'interface, les résultats numériques présentés correspondent donc au choix d'une vitesse d'avancée de l'interface environ 2 fois trop grande par rapport à la vitesse réelle pour les mêmes conditions technologiques.

-Résultats relatifs à la déformation de maillage

On peut voir sur la figure 78, la position de l'interface $S_i-S_iO_2$ pour des intervalles de temps équidistants.

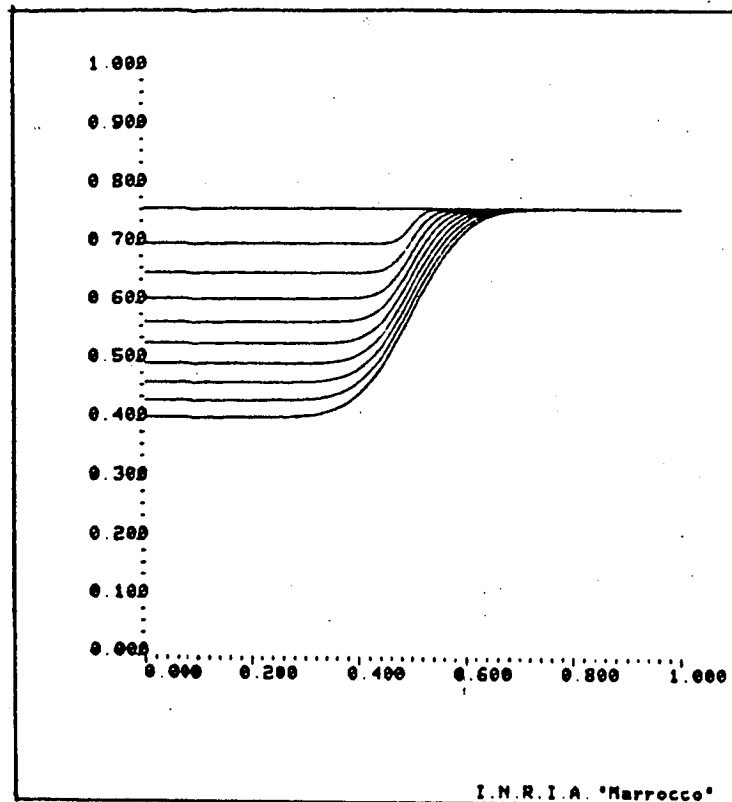
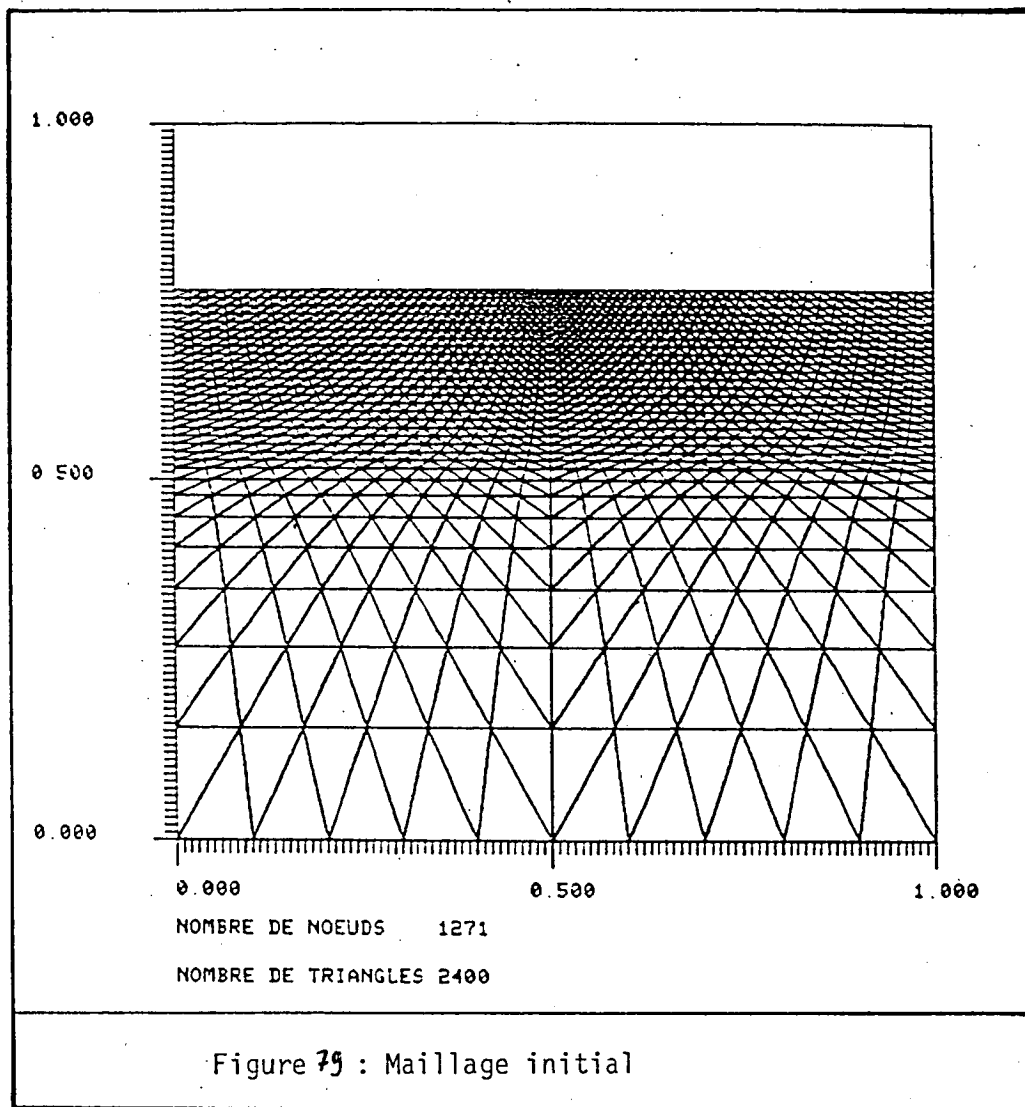


Figure 78 : Position de l'interface $S_i - S_{i0}$ pour les intervalles de temps équidistants.

La figure 79 donne le maillage initial.

La figure 80 donne le maillage que l'on obtient après 40 pas de temps, en appliquant pour chaque pas la formule donnée en (20) avec $\beta = 4$. On a de plus, pour ce cas imposé des déplacements pour les noeuds du bord inférieur, mais pour les essais de simulation ces noeuds seront laissés fixes.



On peut voir sur les figures (81) et (82) les déformations des deux premières couches de triangles (pour les dix premiers pas de temps) lorsque le paramètre β de la formule (21) vaut 2 (figure 81) et 4 (figure 82).

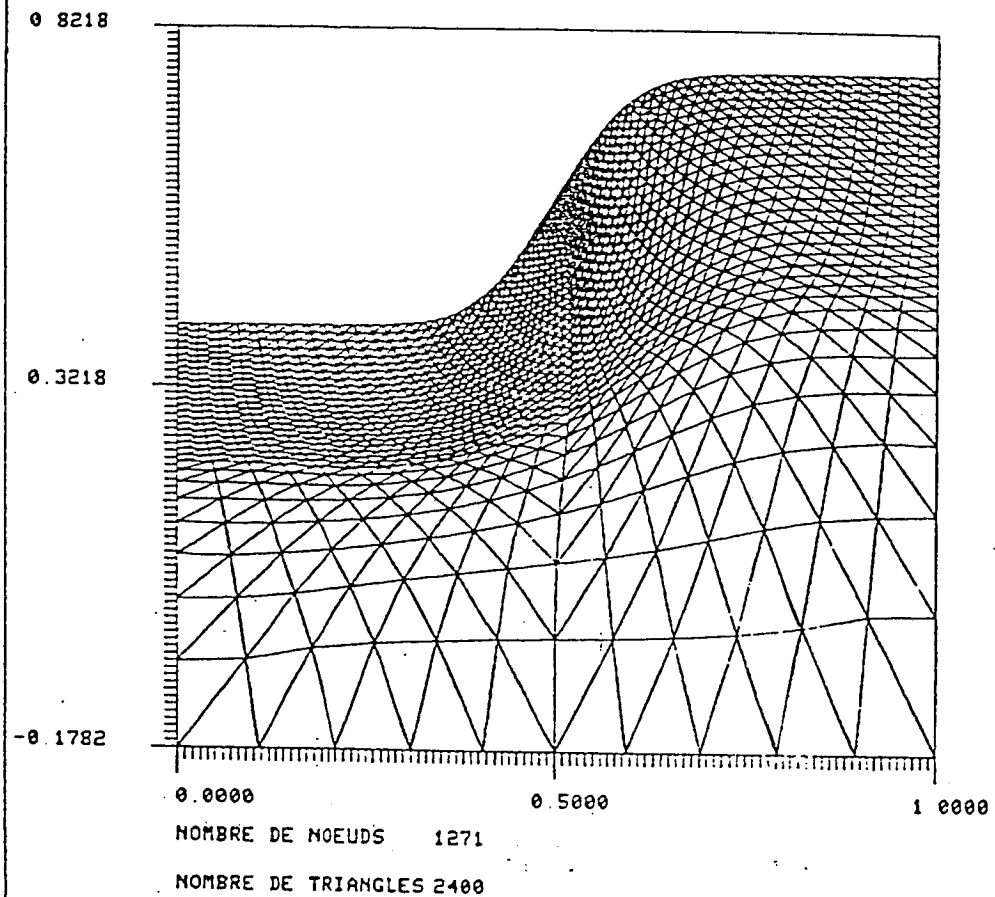


Figure 80 : Maillage obtenu après 40 pas de temps (1 heure)
Selon la loi donnée en (23)

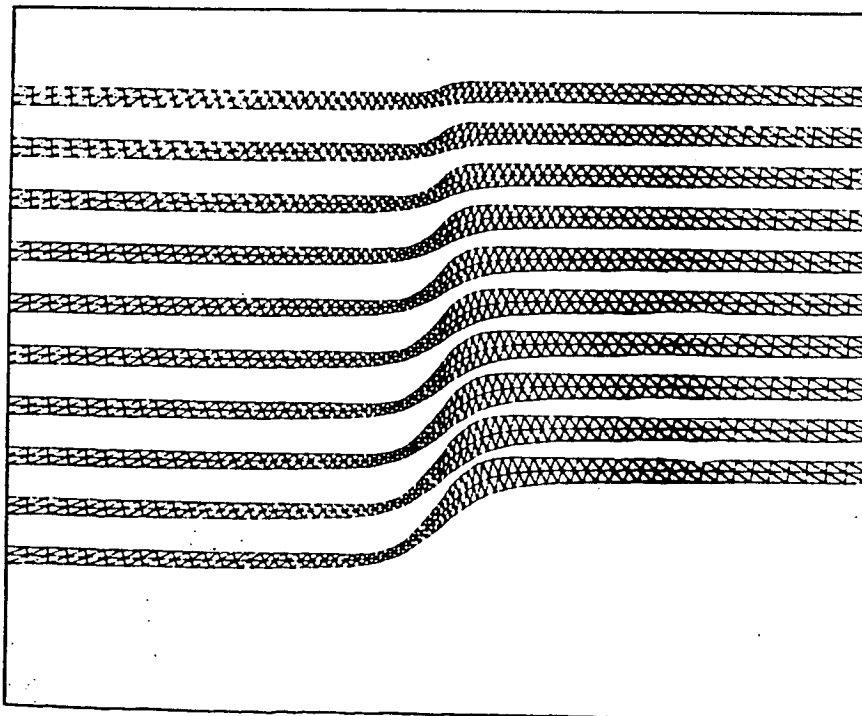


Figure 81 : Deformation des deux première couches de
triangle pour $\beta = 2$.

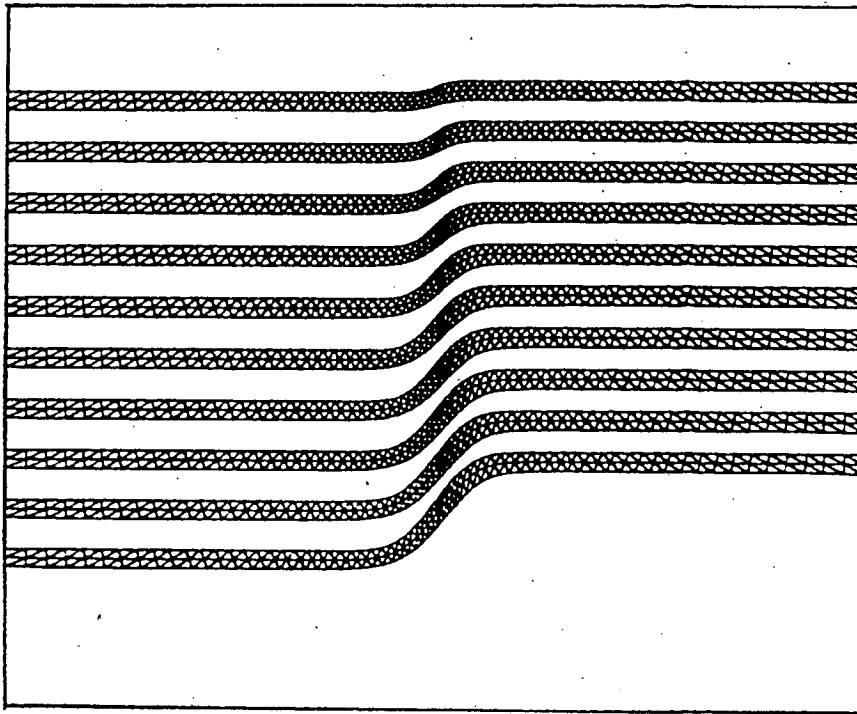
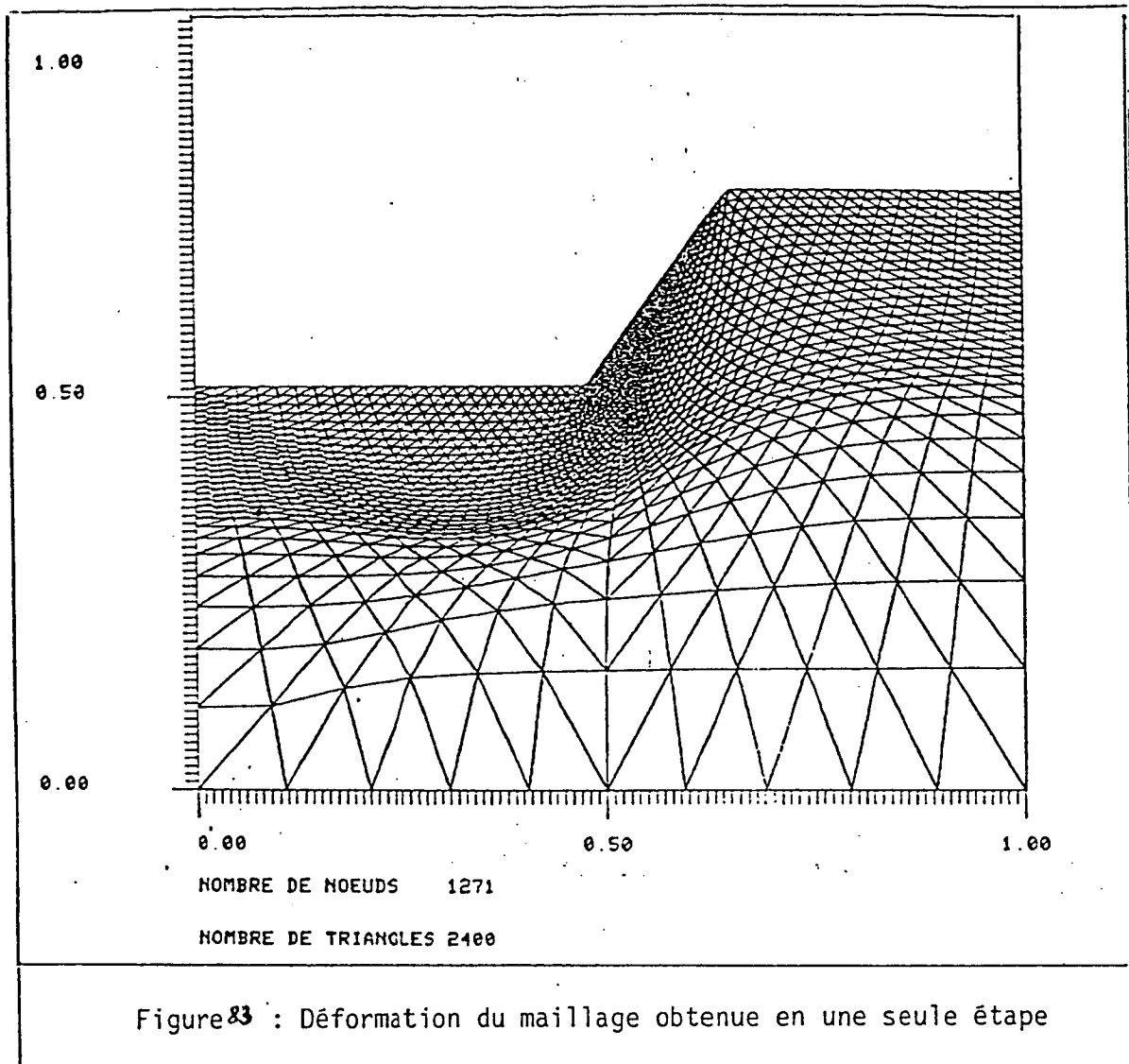


Figure 82 : Déformation des deux premières couches de triangles pour $\beta = 4$.

Nous avons donc à notre disposition une méthode robuste de déformation de maillages, supportant même des déformations assez brutales (de grande amplitude), voir pour cela la figure 83, donnant la déformée du maillage initial en une seule étape du type (20). Ce genre de transformations pourra trouver des applications dans d'autres étapes du process modelling (etching par exemple).



La méthode de déformation de maillages proposée est relativement peu coûteuse en temps calcul, de plus si les déplacements imposés sur le bord varient régulièrement, il est possible de ne pas considérer tous les points de la frontière dans (20) mais par exemple 1 sur 2 (pour des résultats comparables mais avec un temps de calcul divisé par 2, d'ailleurs pour les résultats présentés sur la figure 82, nous avons adopté cette stratégie).

5. RESULTATS NUMERIQUES

A l'aide de (14) nous avons simulé la diffusion d'impuretés avec oxydation locale en partant d'une condition initiale correspondant à une double implantation ionique : tout d'abord une implantation de Bore sur toute la surface avec une dose 10^{14} et une énergie de 100 Kev, puis une implantation ionique d'Arsenic à travers un masque (moitié de la surface) avec une dose de $5 \cdot 10^{15}$ et une énergie de 80 Kev.

La diffusion des impuretés et l'oxydation du silicium s'est poursuivie pendant 1 heure à 1000 degrés C [avec une vitesse d'avancée de l'interface définie par (23)].

Test Numérique 1

On suppose dans ce premier test que le coefficient de ségrégation m est infini ($\Leftrightarrow h=0$), autrement dit rien ne passe dans l'oxyde et les doses initiales d'impuretés doivent se conserver dans le silicium.

Le terme "intégrale frontière" du premier membre disparaît ainsi que le dernier terme du second membre ($h=0$).

On retrouve dans une formulation classique du problème de diffusion avec un second membre tenant compte de la déformation du domaine Ω (et du maillage).

Voyons maintenant comment on calcule pratiquement le second membre.

Plusieurs variantes de formulation sont possibles pour le flux dû à l'avancée de la frontière, citons par exemple

$$(25) \quad a) \quad - \int_{\Gamma_{n+1}^{int}} \vec{pl} \cdot \vec{n} \quad C_n w_i^n d\Gamma$$

(25) b) - le terme tel qu'il est donné dans (14) ou (17).

Dans 25-a on calcule exactement cette intégrale à l'aide de formules de GAUSS à 2 points car on a un polygone du 3ème degré sur chaque segment frontière. Dans 25-b on utilise une formule du type trapèzes en subdivisant chaque segment frontière en p intervalles. ($C_{\Gamma_{n+1}}^n$ ne varie pas linéairement sur chaque segment frontière mais

est seulement linéaire par morceaux).

Si on se reporte à la figure (34), la contribution de l'intégrale frontière au noeud i calculée sur Γ_n (ou Γ_{n+1}), est en fait une approximation de l'intégrale des concentrations d'impuretés sur la zone hachurée avec une fonction de base w_i un peu spéciale et décrite sur la figure 35.

Le terme dû à la variation du maillage dans Ω_{n+1} , est donné, rappelons le par

$$(26) \quad - \int_{\Omega_{n+1}} [\tilde{C}^n - C^n] w_i^{n+1} dx = - \int_{\Omega_{n+1}} \sum_k [C_k^n w_k^{n+1} - C_k^n w_k^n] w_i^{n+1} dx$$

Sur chaque triangle de $\mathcal{T}_{h,n+1}$ l'intégrale est calculée par intégration numérique (différentes formules ont été utilisées), l'intégration exacte nécessiterait de définir une triangulation plus fine, commune aux deux maillages $\mathcal{T}_{h,n}$ et $\mathcal{T}_{h,n+1}$.

Ainsi (26) est évalué par

$$(27) \quad \sum_{T \in \mathcal{T}_{h,n+1}} S_T \left(\sum_{x_p \in T} \alpha_{xp} [\tilde{C}^n(x_p) - C^n(x_p)] \right) w_i^{n+1}(x_p)$$

S_T désigne l'aire du triangle $T \in \mathcal{T}_{h,n+1}$

x_p désignent les points d'intégration dans $T \in \mathcal{T}_{h,n+1}$


α_{xp} sont les coefficients de pondération

$\tilde{C}^n(x_p)$ se calcule directement à partir des valeurs aux sommets de T et des coordonnées barycentriques de x_p dans T, par contre pour


$C^n(x_p)$ il faut retrouver le triangle T' de la triangulation

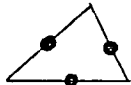
$\mathcal{T}_{h,n}$, contenant le point x_p , déterminer ses coordonnées barycentriques dans ce triangle et calculer à l'aide de cela la valeur de la concentration en ce point (technique liée à la méthode des caractéristiques).

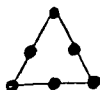
Différentes formules d'intégration ont été testées.

(28) F1 :  sommets du triangle T (mass-lumping)

(29) F2 :  barycentre de T (approximation linéaire)

(30) F3 :  formule à 7 points (quintique)
(voir [10] par exemple)

(31) F4 :  milieux des côtés (quadratique)

(32) F5 :  sommets et milieux de côtés (voir [30]) (cubique)

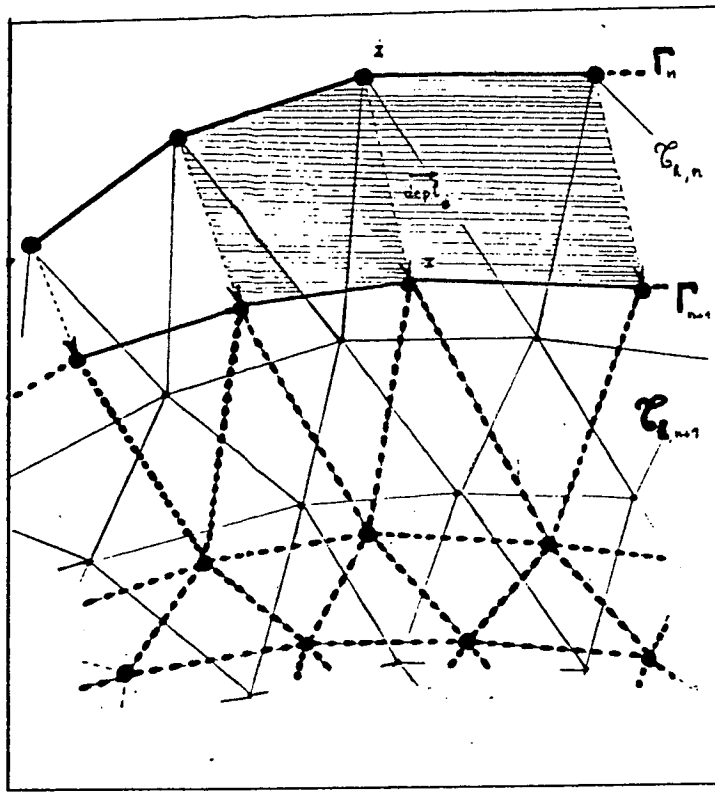


Fig 84 : Représentation des maillages $\mathcal{C}_{h,n}$ et $\mathcal{C}_{h,n+1}$ - Evaluation de la contribution du flux au noeud I.

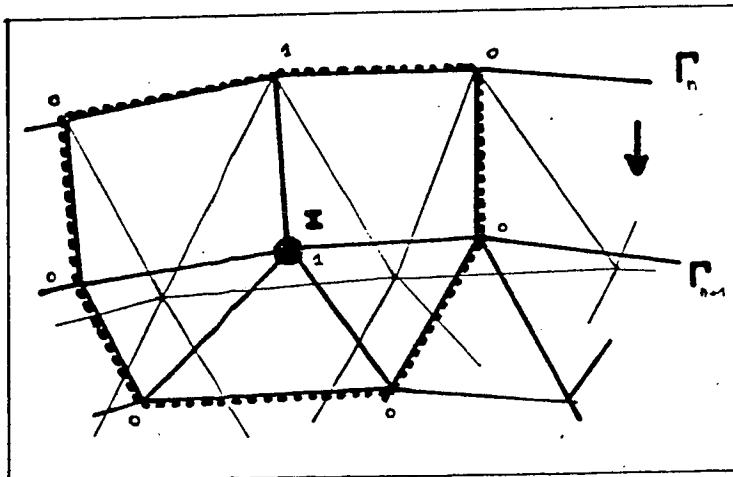


Fig 85 : Fonction de base associée au noeud I de la frontière mobile.

Les essais relatifs aux figures 86, 87, 88, 89 sont relatives à un maillage grossier comportant 231 sommets et 400 triangles.

Le pas de temps initial τ est choisi à 0.01 mn et multiplié par $\sqrt{2}$ à chaque pas jusqu'à obtenir un τ_{\max} de 4 mn. Le process se poursuit pendant 60 mn (correspondant à 30 pas de temps).

Sur les figures 86 à 89 nous avons représenté la variation (en %) de la dose initiale en fonction du temps et pour les différentes méthodes d'intégration numérique.

La figure 86 donne la variation de la dose d'Arsenic au cours du process, lorsque l'on prend (25-a) pour le calcul du flux dû à l'avancée de l'interface $S_i-S_iO_2$.

On a représenté 5 courbes représentant les 5 méthodes d'intégration numérique F1 à F5.

La figure 87 donne dans les mêmes conditions la variation de la dose de Bore, on n'a représenté que les courbes correspondant à F1 et F3, (les autres étant très voisines).

La figure 88 donne la variation de la dose d'Arsenic au cours du process, lorsqu'on prend (25-b) pour le calcul du flux dû à l'avancée de l'interface. Pour application de la formule des trapèzes on a subdivisé chaque segment frontière en 10 sous-intervalles.

La figure 89 donne la variation de la dose de Bore dans les mêmes conditions que pour la figure 13. On voit donc comme on pouvait s'y attendre que la formule (25-b) est meilleure que la formule donnée par (25-a) et qu'il faut intégrer avec suffisamment de précision le terme (26) lié à la déformation du maillage. En prenant la formule F1 (mass lumping), on calcule en fait le second membre de l'équation de diffusion, par interpolation sur le maillage $\mathcal{T}_{h,n+1}$ de la solution au temps n et comme on peut le voir cette méthode ne donne pas de bons résultats.

Nous avons aussi regardé ce que donnait la formule que nous avons retenue (14) en utilisant un maillage plus fin (maillage donné sur la figure 79, comprenant 1271 noeuds et 2400 triangles). Nous avons utilisé la formule (25-b) pour le calcul du flux dû à l'avancée frontière et intégré (26) avec la formule d'intégration numérique F3 (à sept points). Partant d'un pas de temps initial τ de 0.01 mn, on multiplie le pas de temps à chaque étape par $\sqrt{2}$ jusqu'à un $\tau_{\max} = 1.25$ mn. Les résultats que l'on obtient au bout de 60mn (une soixantaine de pas de temps) sont les suivants :

- variation de la dose d'Arsenic : + 0.22 %
- variation de la dose de Bore : - 0.36 %

Test Numérique 2

On tient compte cette fois-ci de la ségrégation en prenant dans (14), $h = 0.1$ pour l'Arsenic et $h = 3.3$ pour le Bore. Le pas de temps initial est 0.01 est multiplié à chaque étape de temps par $\sqrt{2}$ jusqu'à une valeur $\tau_{\max} = 4$ mn.

Le processus d'oxydation se poursuit pendant 60m (30 pas de temps).

On a représenté sur la figure 90 les isovaleurs de la distribution de Bore à la fin du process. On a représenté de même les isovaleurs de la distribution d'Arsenic sur la figure 91. Sur la figure 92 est matérialisée la jonction réalisée. Sur la figure 93 on a représenté une coupe de la solution calculée (à une distance $0.25\mu\text{m}$ du bord); avec une variation logarithmique des concentrations.

Durant le processus 52 % des impuretés d'Arsenic sont posées dans l'oxyde ainsi que 40 % des impuretés de Bore.

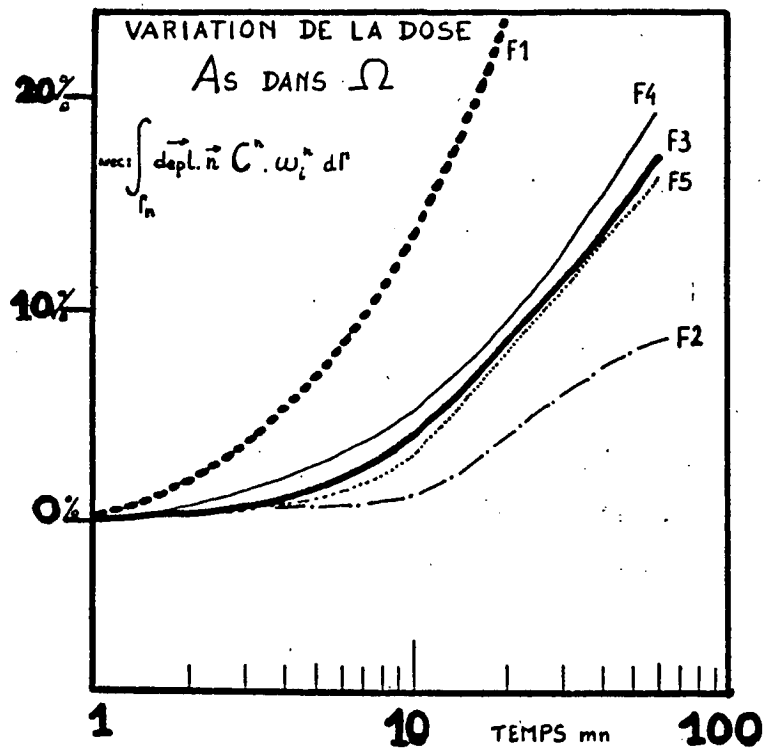


Fig 86 : Expérience Numérique 1 avec flux donné par 25-a. Variation de la dose d'As selon l'intégration numérique utilisée.

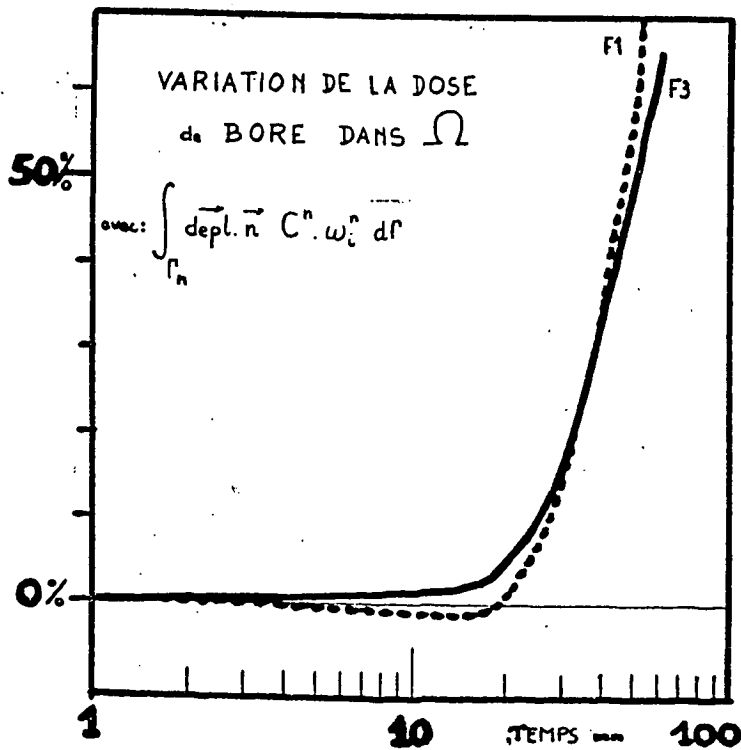


Fig 87 : Expérience Numérique 1 ; avec flux donné par 25-a. Variation de la dose de Bore selon l'intégration numérique.

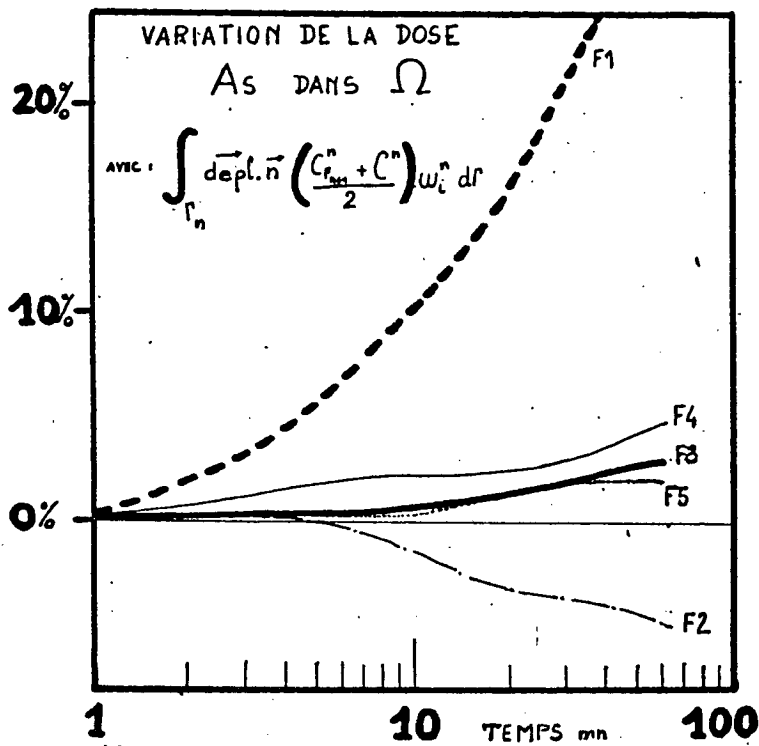


Fig 38 : Expérience numérique 1, avec flux donné par 25-b. Variation de la dose d'Arsenic, selon l'intégration numérique utilisée...

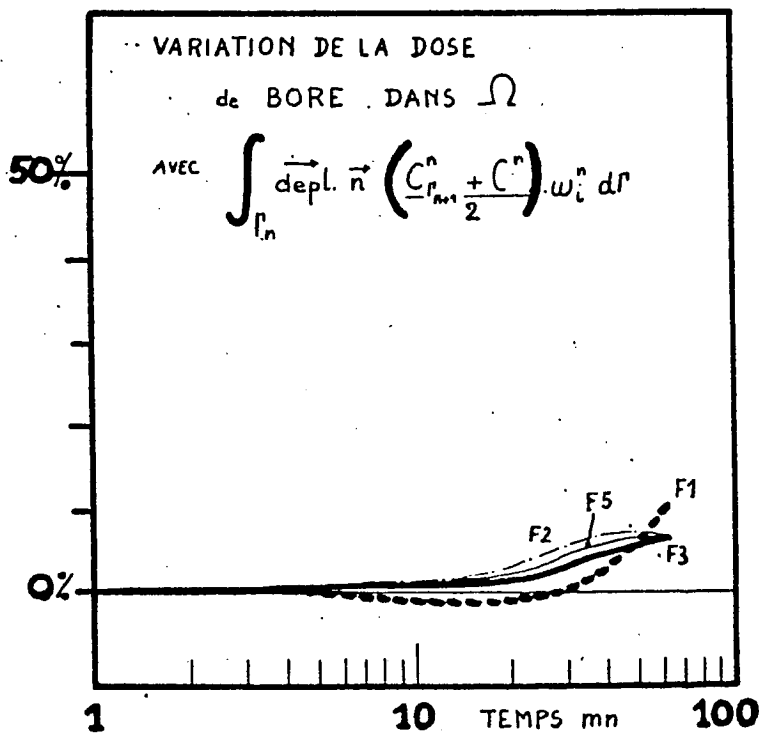


Fig 39 : Expérience numérique 1, avec flux donné par 25-b. Variation de la dose de Bore selon l'intégration numérique utilisée.

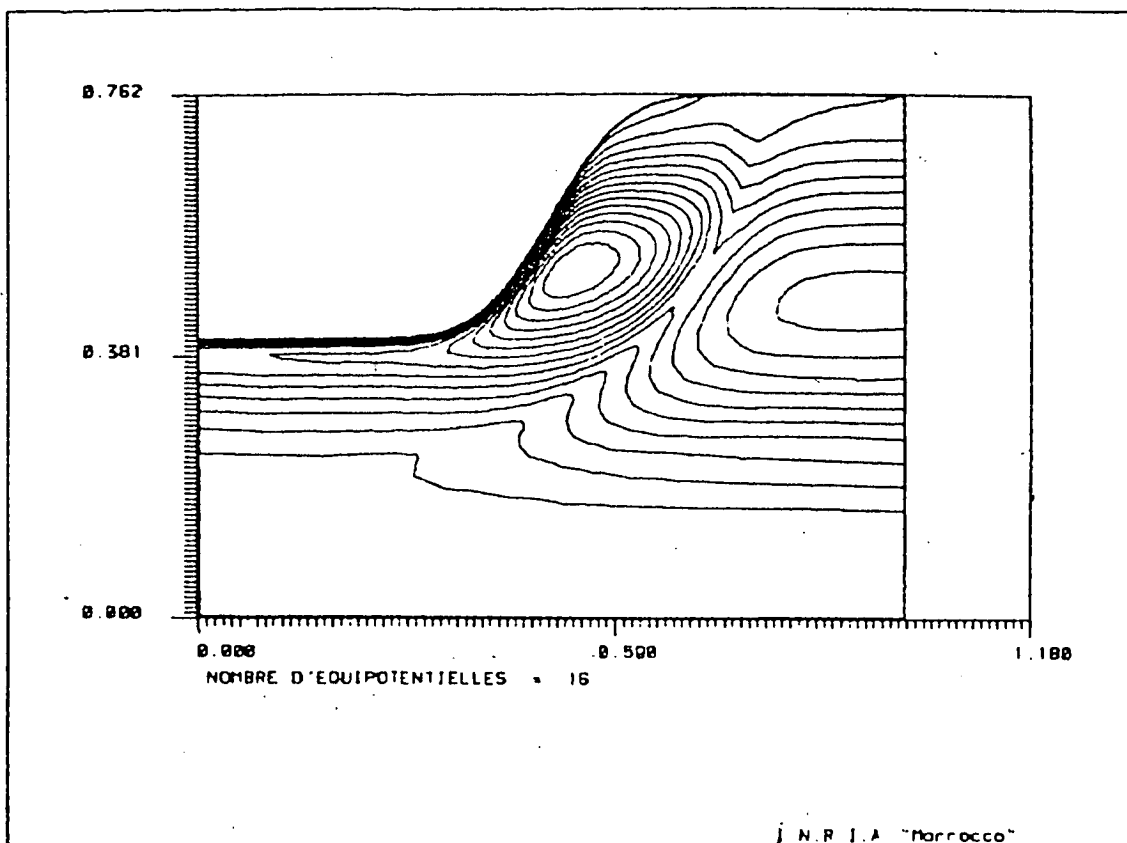


Fig 90 : Expérience numérique 2. Isovaleurs de la concentration de Bore à la fin du process.

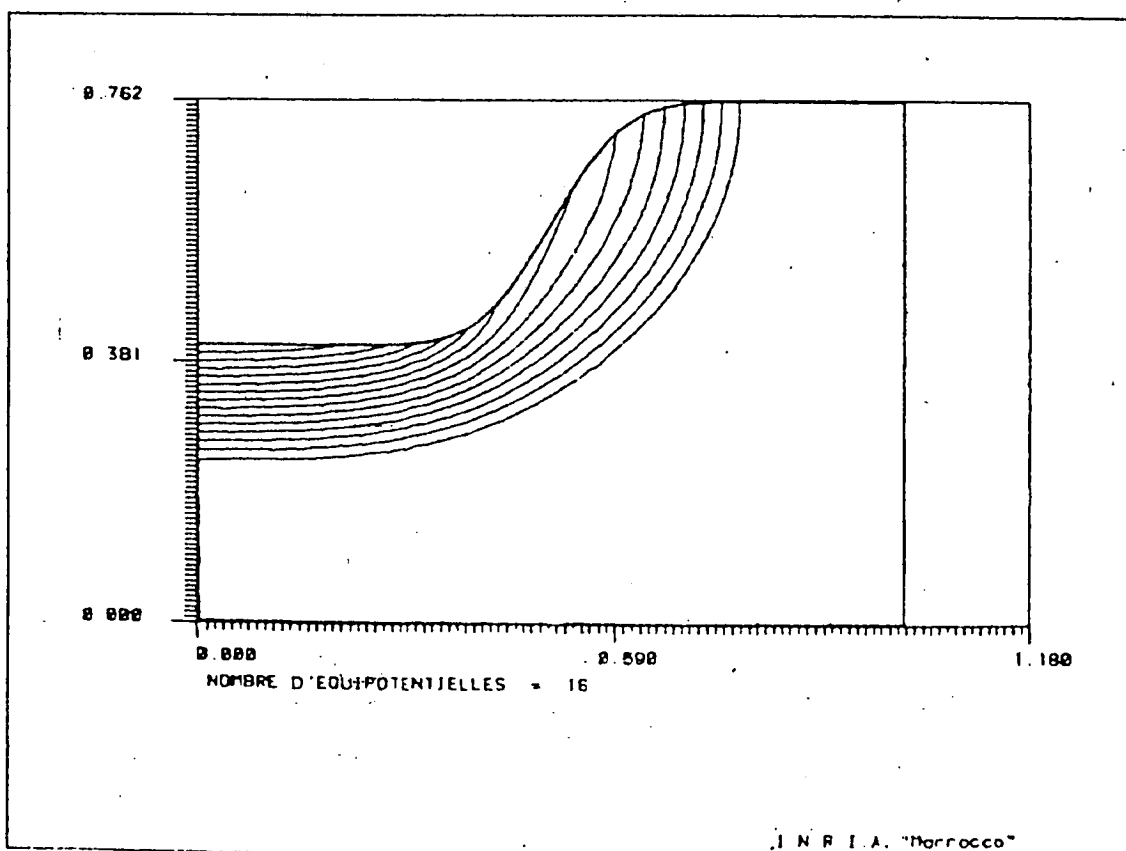


Fig 91 : Expérience numérique 2. Isovaleurs de la concentration d'Arsenic à la fin du process.

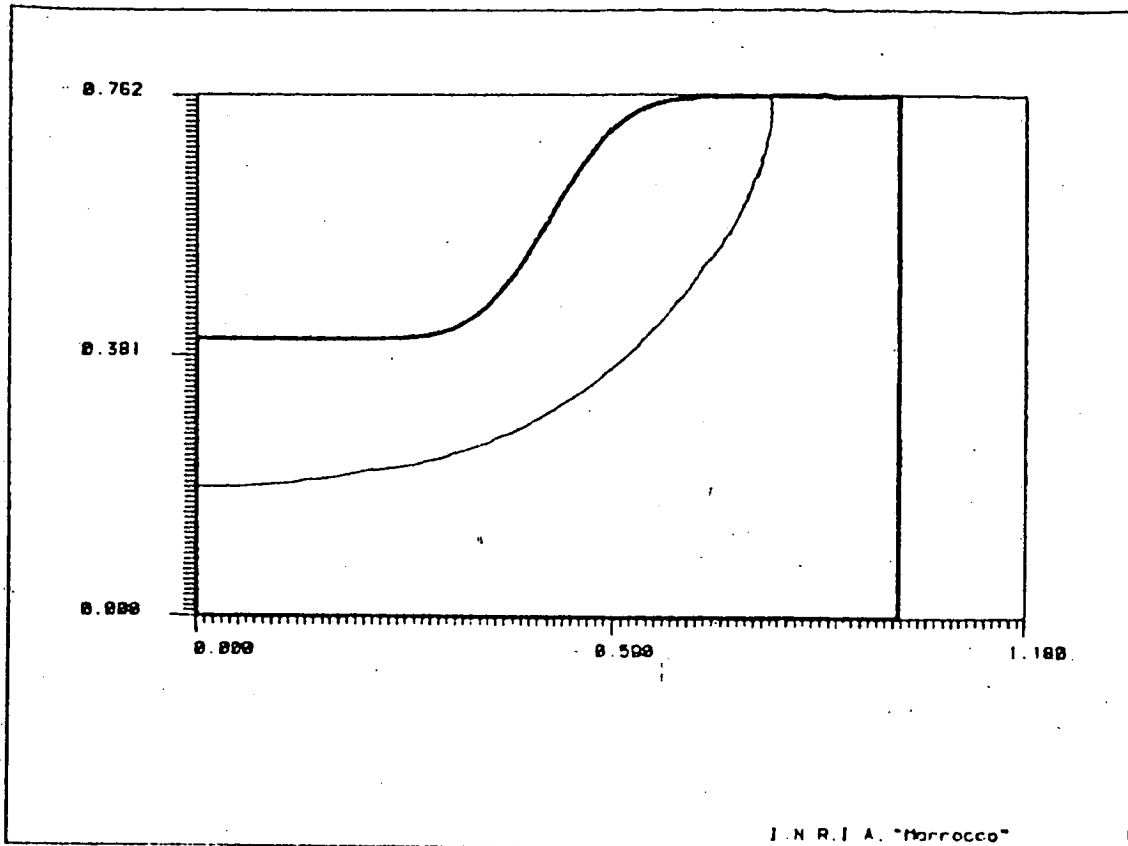


Fig 92 : Jonction réalisée à la fin du process.

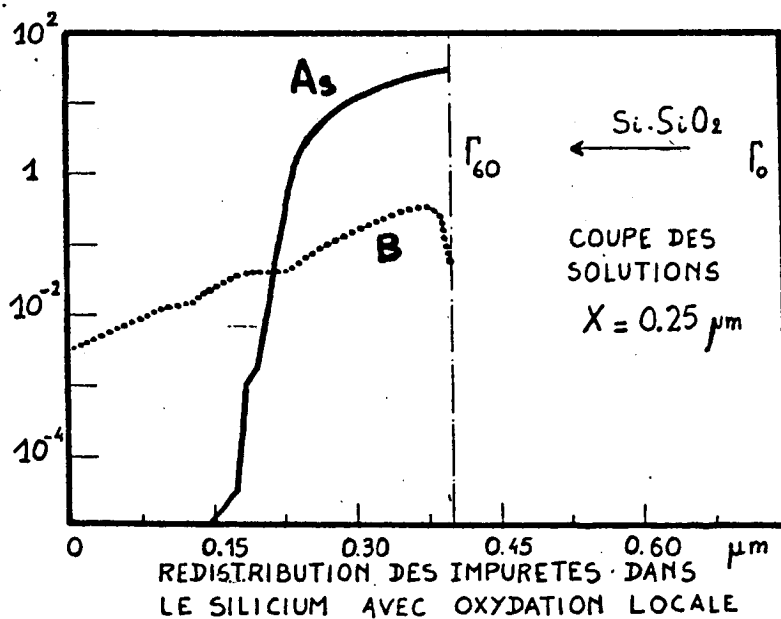


Fig 93 : Coupe de la distribution des impuretés (Echelle logarithme des concentrations normalisées).

On donne sur la figure 94, la distribution initiale en impuretés résultant de la double implantation ionique (d'abord implantation de bore à travers toute la surface du silicium, puis implantation d'arsenic à travers le masque - moitié de la surface.).

Les valeurs des énergies et des doses sont celles indiquées au début du paragraphe relatif aux résultats numériques.

Pour l'arsenic situé en haut à gauche, la valeur maximum de la concentration vaut 187,7 en valeur normalisée, alors que pour le bore qui est implanté plus profondément, et qui est étalé, au vu des équipotentiellles, la valeur maximum est 0.966.

Sur la figure, les lignes de niveau (équiconcentrations) sont equidistribuées entre la valeur maximum et la valeur minimum des concentrations, suivant l'échelle linéaire.

La figure 95 donne la répartition d'Arsenic après 30 s de process. La valeur maximum de la concentration vaut 99,04 (valeur normalisée).

Les figures 96 et 97 donnent les distributions d'Arsenic et de Bore après 20 minutes du processus d'oxydation.

La valeur maximum de la concentration d'Arsenic est 58.73 et celle de bore (fig. 97) est 0.803.

Sur la figure 98 on a reporté la variation (en pourcentage) des doses d'Arsenic et de bore au cours du processus d'oxydation.

Sur les figures 99, 100 et 101 nous avons donné des coupes de la solution (analogue à la figure 93) ; l'échelle pour la représentation des concentrations est logarithmique et la valeur de ces concentrations est normalisée.

La figure 99 donne la coupe à $x = 0.5 \text{ m}$, la figure 100 à $x : 0.65 \text{ m}$.

La figure 101 donne la coupe suivant une diagonale c'est à dire ; le point de départ est (0,0) et le point final est (1, 0.762).

Nous donnons sur les figures 102 à 113 des représentations tridimensionnelles de la distribution des impuretés.

Tout d'abord la figure 102 donne la séparation initiale d'Arsenic (après implantation ionique).

La figure 103 donne la répartition après 8,7 mn, la figure 104 après 60 mn de process.

Les figures 105 et 106 donnent d'autres vues de ces répartitions à 8.7 et 20 mn.

La figure 107 représente elle la répartition initiale de Bore (implantation ionique sur toute la surface). Les échelles de représentation ne sont pas les mêmes que précédemment. Pour l'Arsenic la graduation va de 10^{16} à 10^{22} At/cm³, pour le bore cette graduation va de 10^{14} à 10^{19} .

Sur les figures 108 à 113 on donne différentes représentations de la distribution de bore après 8, 7; 20 et 60 mn de processus d'oxydation.

Actuellement les temps de calcul sont relativement longs ; pour un pas de temps de 4 mn, il faut effectuer, pour résoudre le problème non linéaire (14), environ 80 balayages de type relaxation, chaque balayage coutant (pour 2 impuretés) 6 s sur HB.68. Multics. Le processus iteratif est initialisé comme dans le cas classique par la valeur des concentrations au pas de temps précédent, mais le problème ici c'est que le maillage a changé et donc les valeurs nodales présentes constituent une mauvaise initialisation, ce qui pourrait expliquer le nombre élevé d'iterations nécessaires à la résolution.

Il est fort possible qu'en choississant plus astucieusement la valeur initiale de l'algorithme de résolution on diminuerait de façon notable le nombre d'itérations nécessaires.

Nous remercions F. HECHT, Chercheur à l'INRIA pour les fructueuses discussions que nous avons eu avec lui pour la formulation du problème de diffusion en domaine variable.

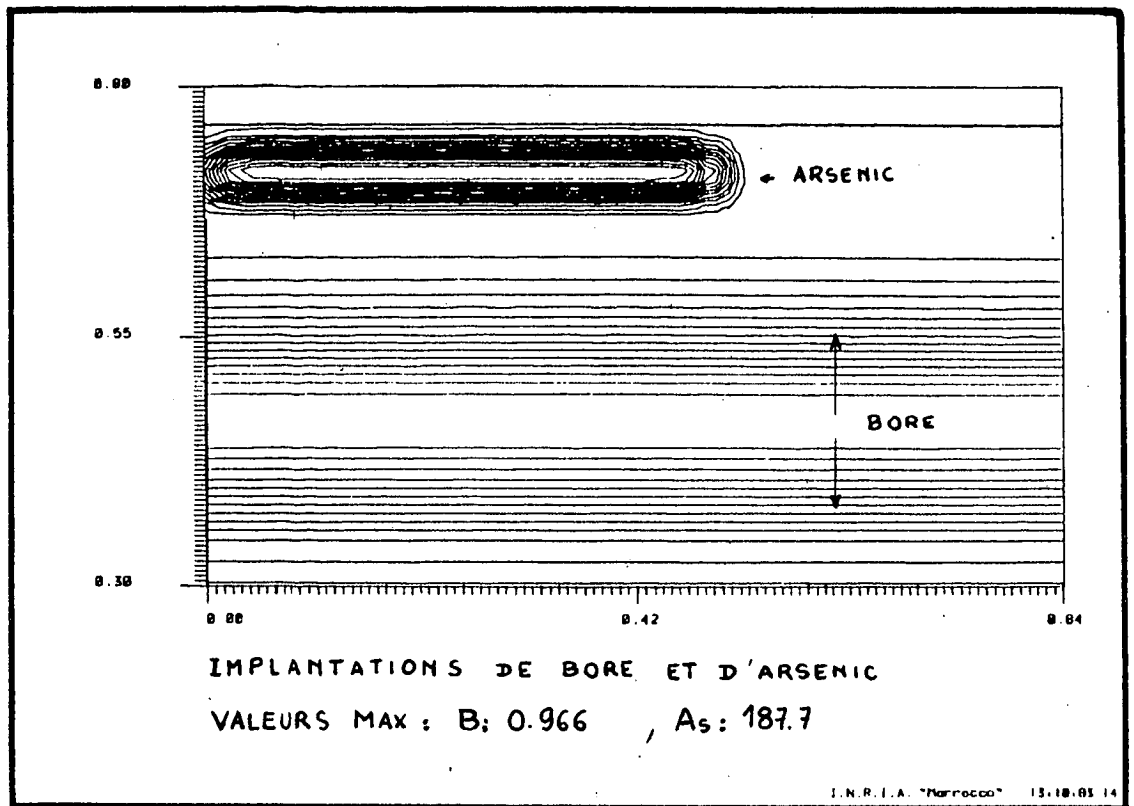


Fig 94. Solutions initiales

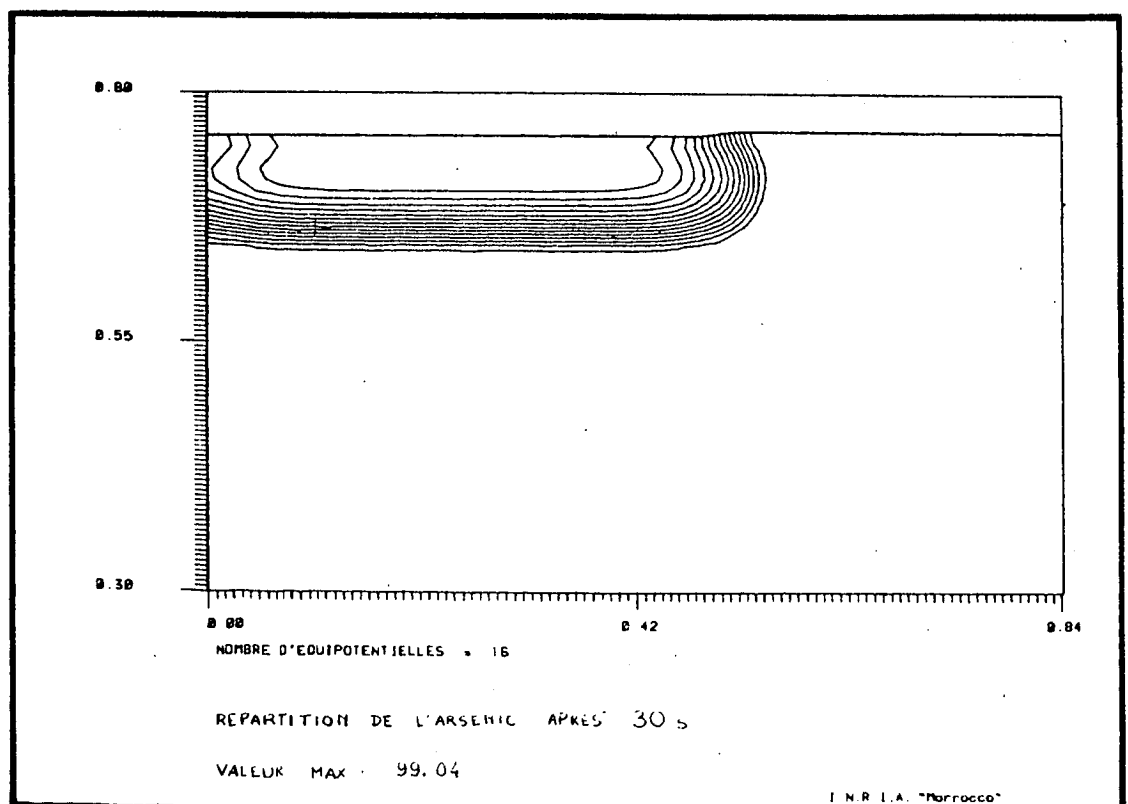


Fig 95. Distribution d'Arsecnic après 30 s.

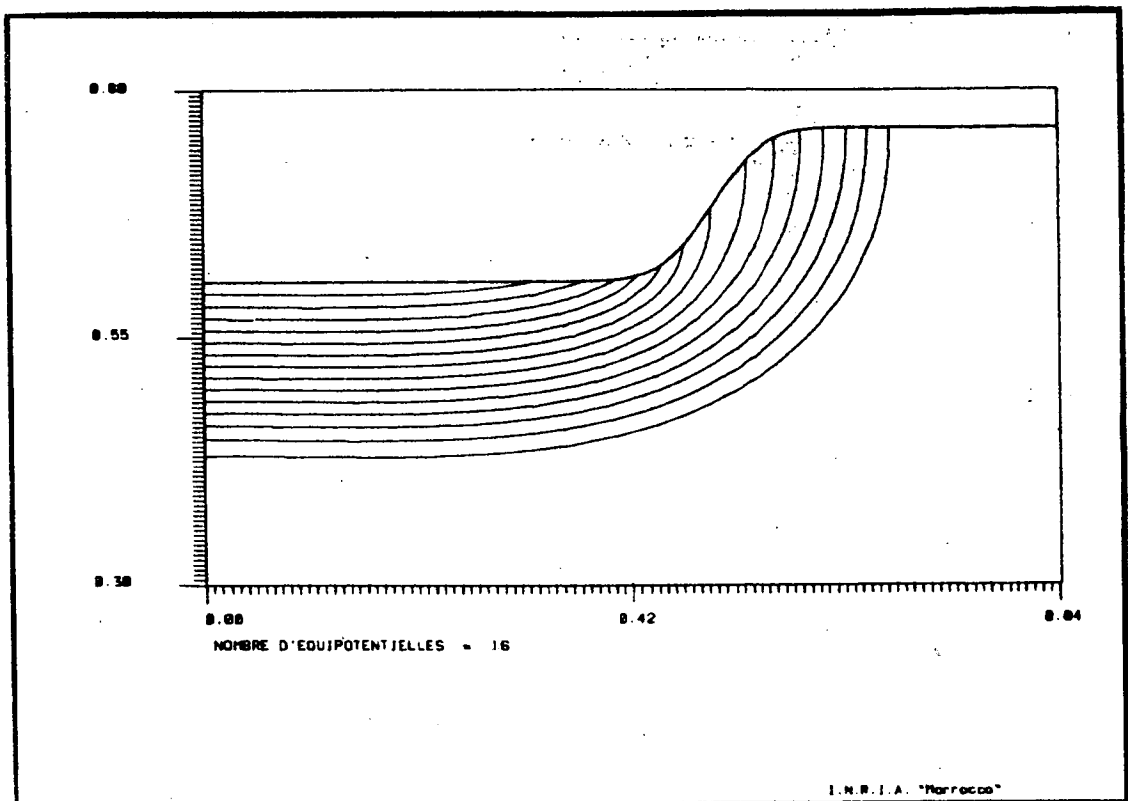


Fig: 96 - Distribution d'Arsenic après 20 mn

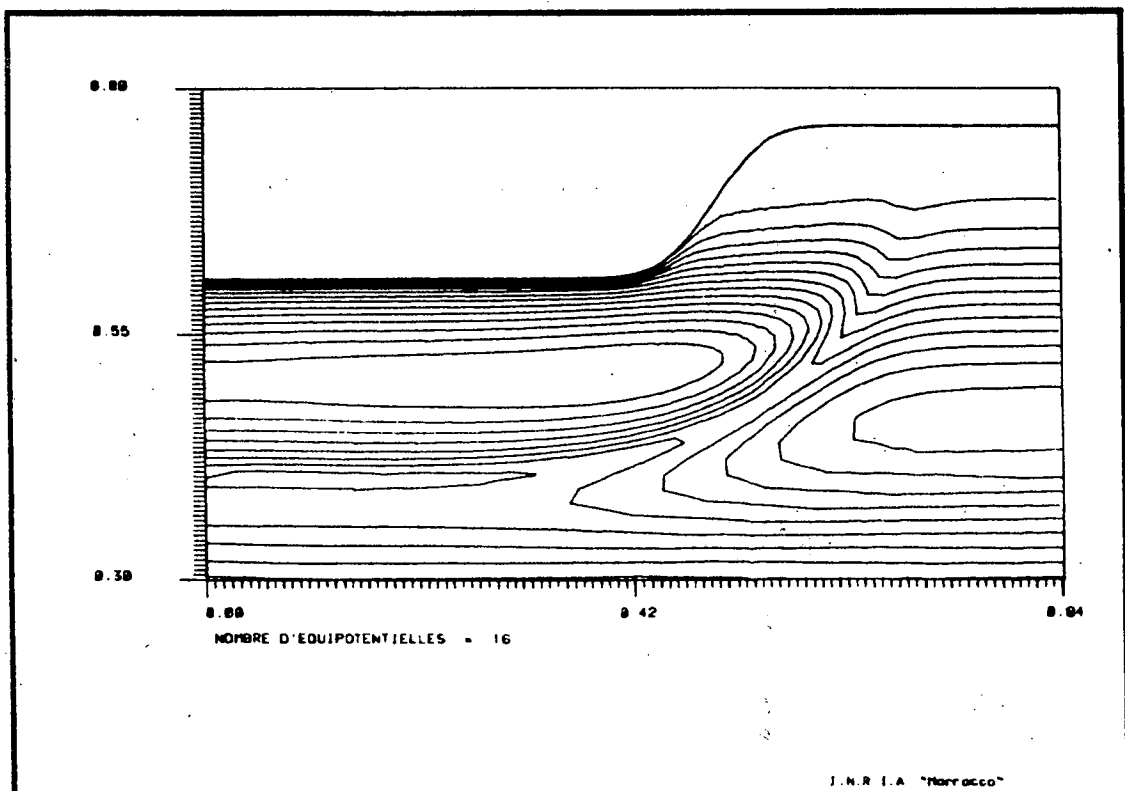


Fig 97. Distribution de Bore après 20 mn

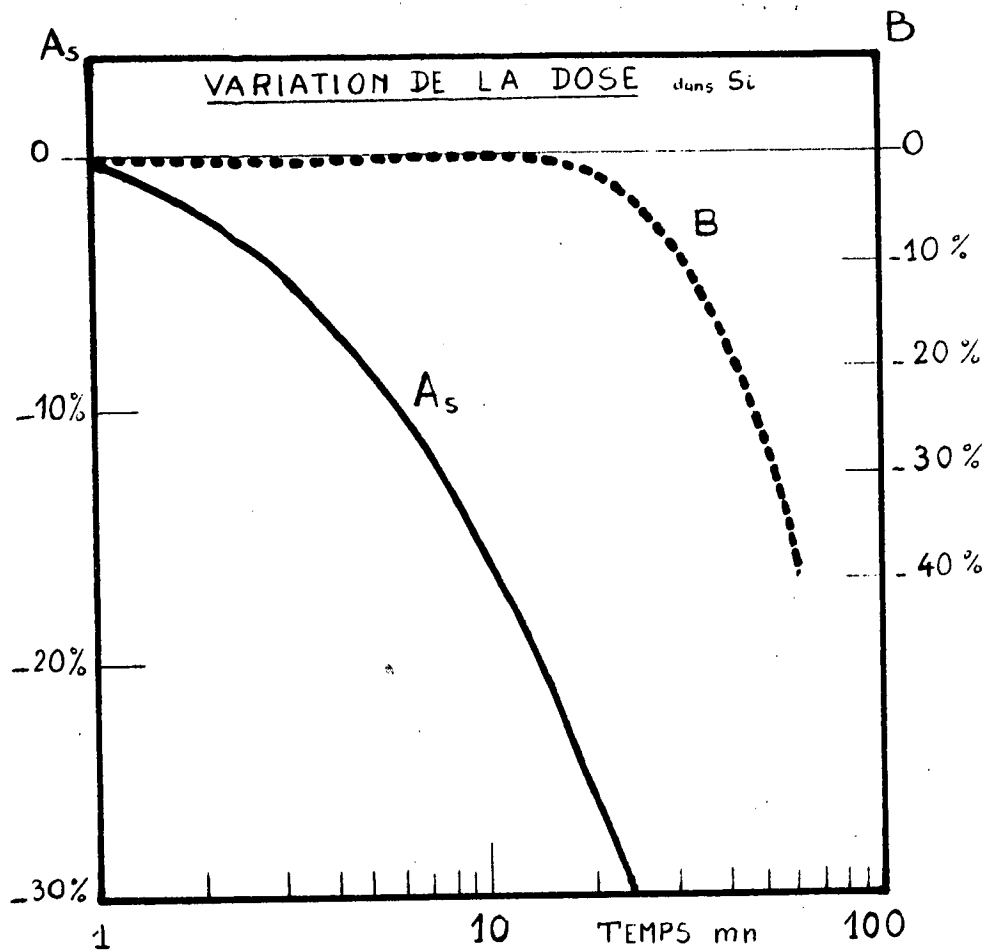


Fig 98 . Pertes en Impuretés au cours du process

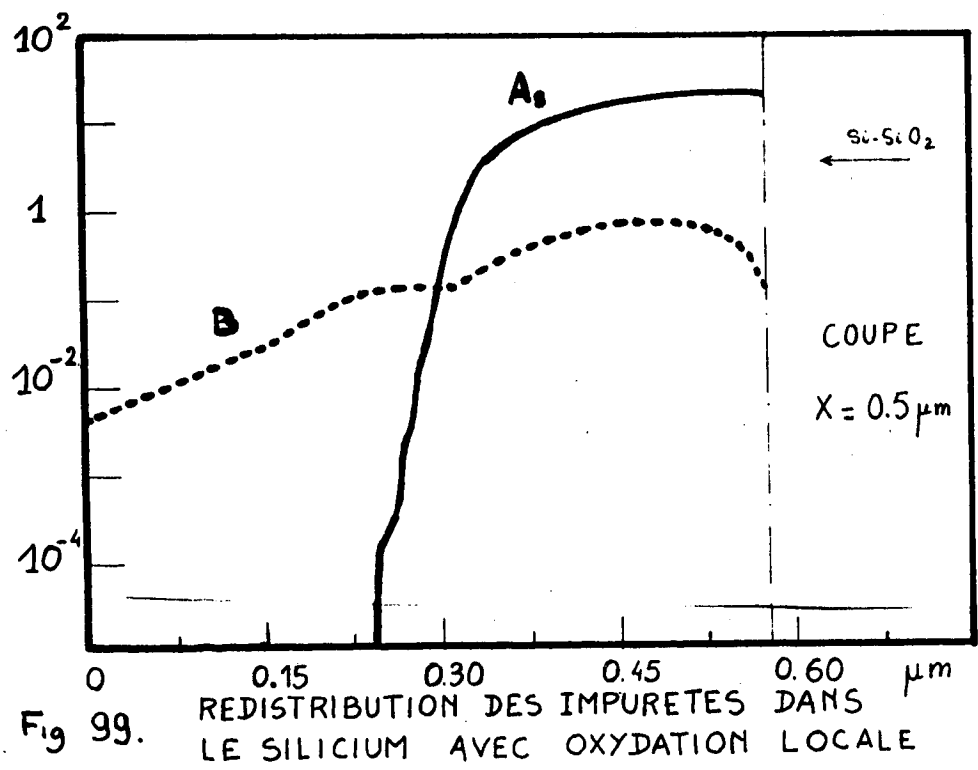
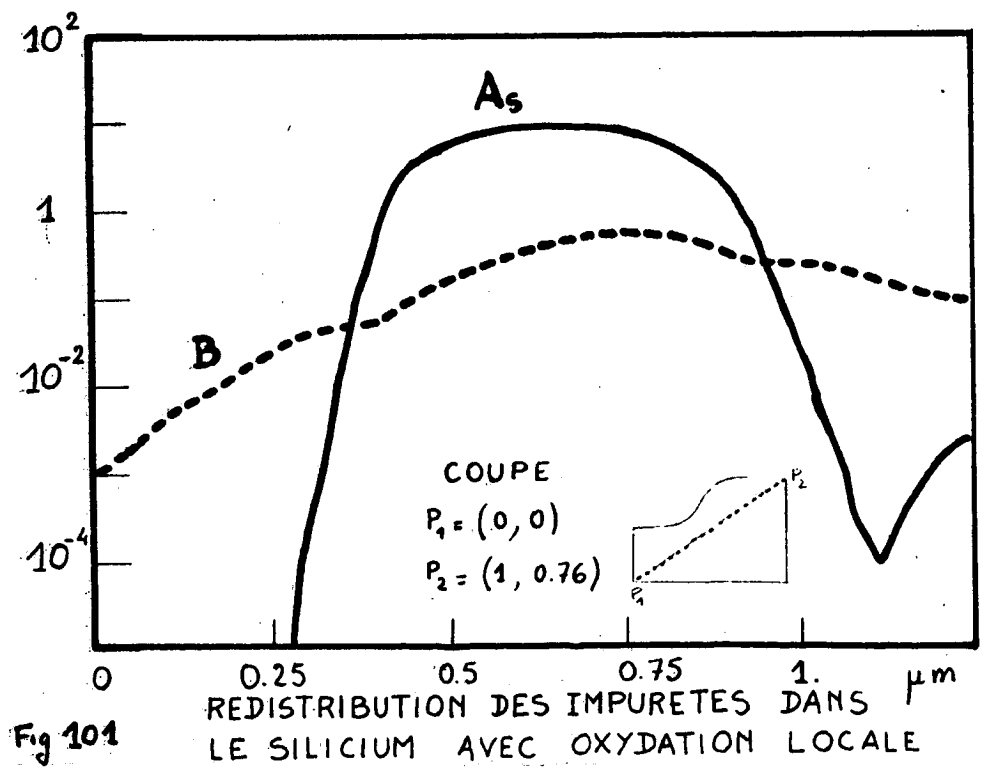
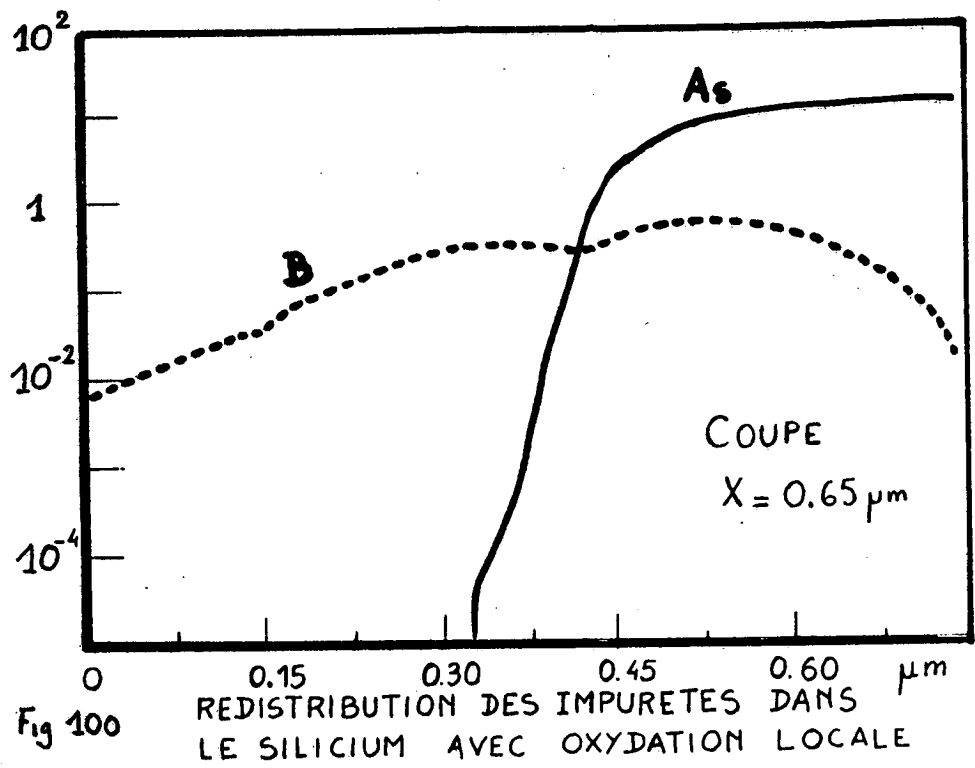


Fig 99. REDISTRIBUTION DES IMPURETES DANS LE SILICIUM AVEC OXYDATION LOCALE



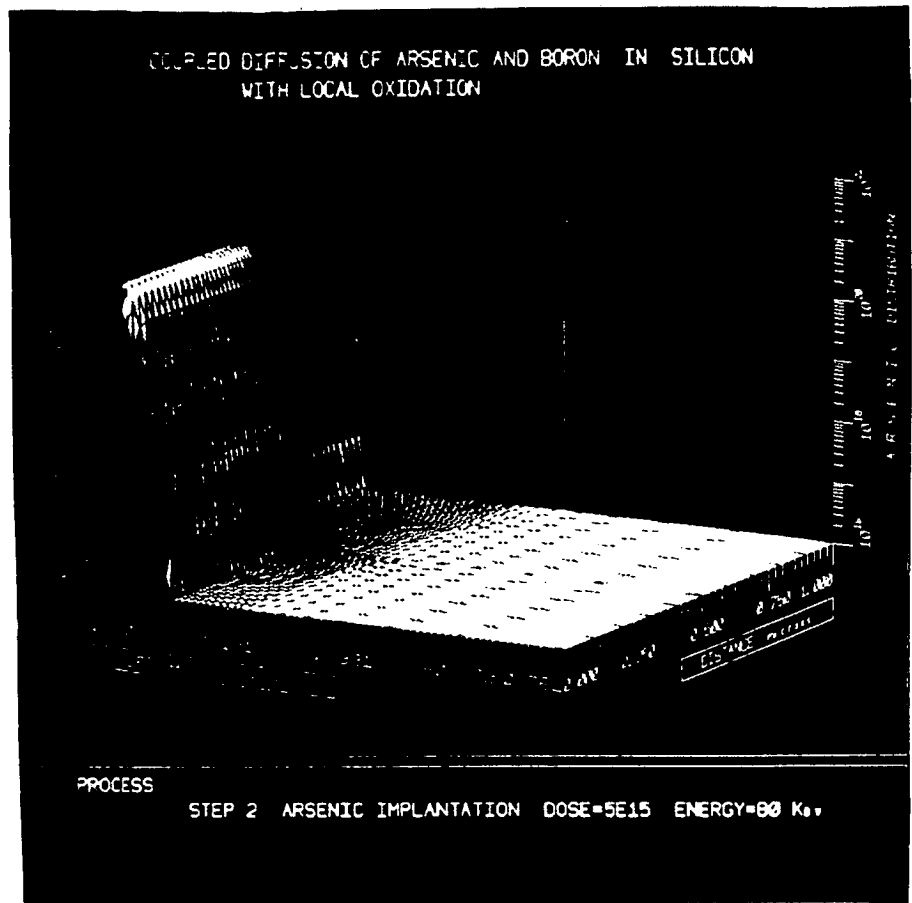


Fig: 102

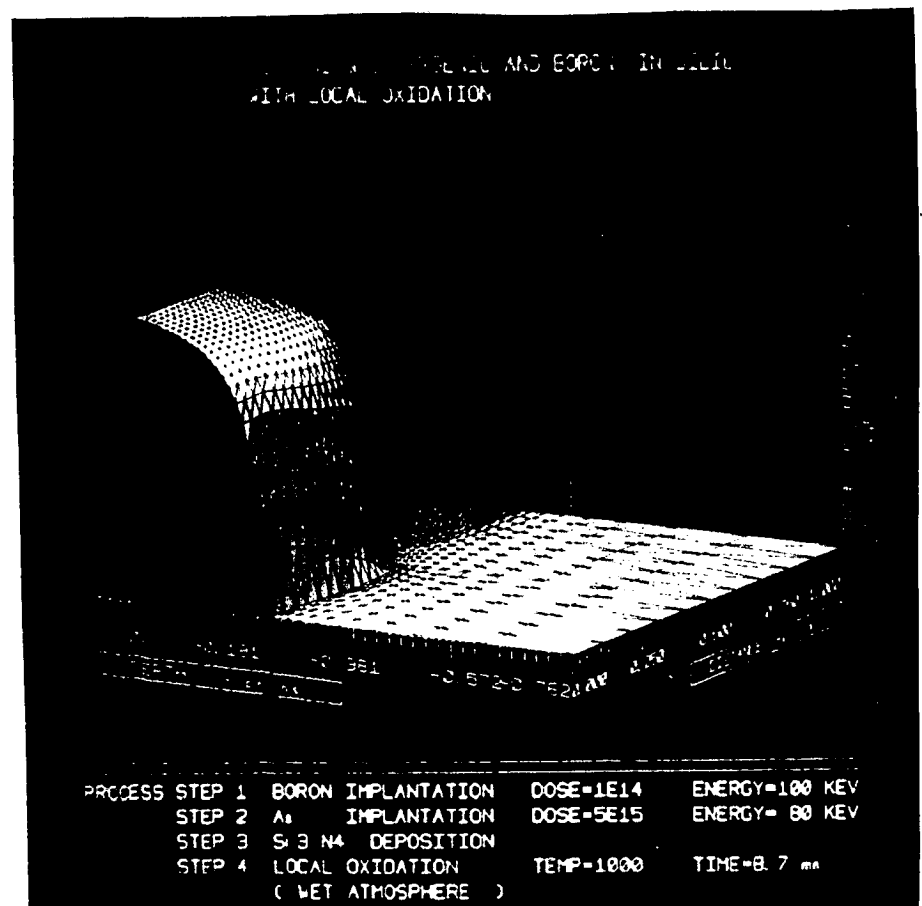


Fig: 103

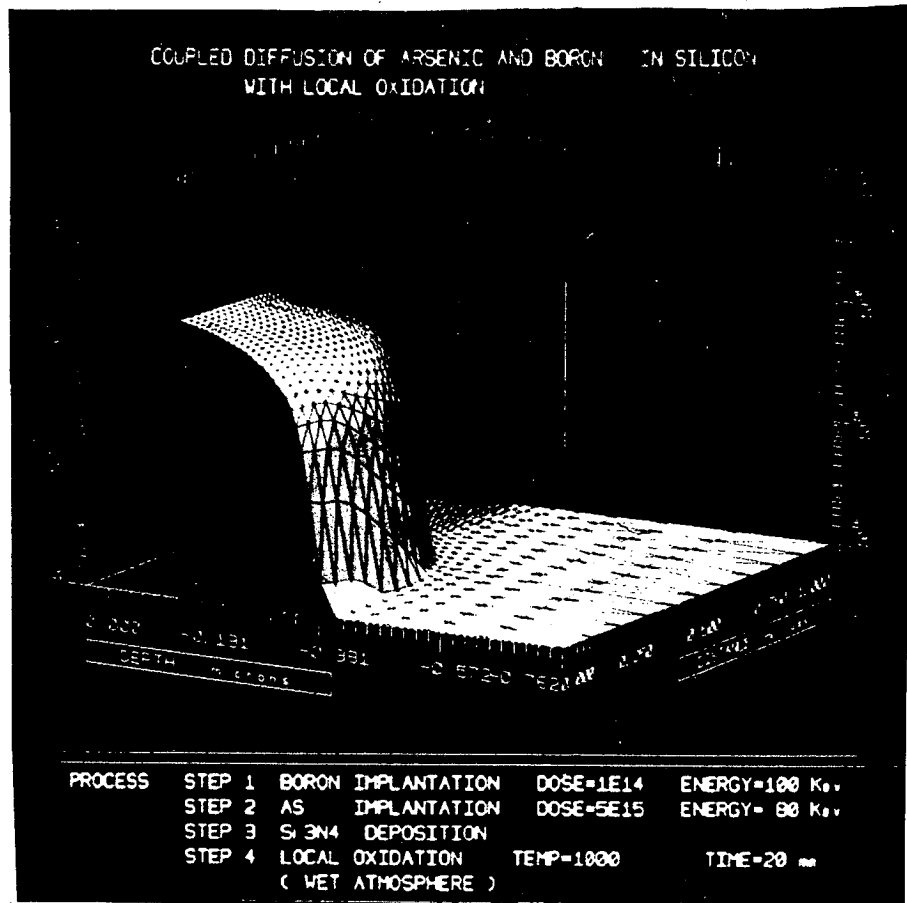


Fig 104

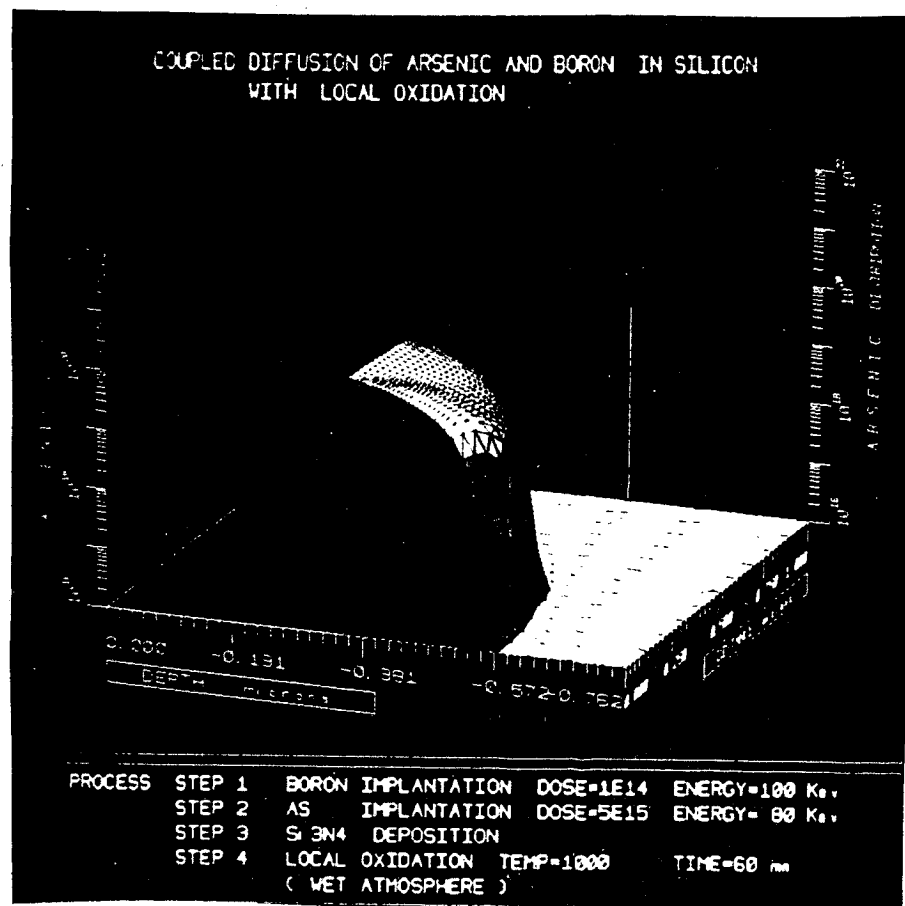


Fig: 105

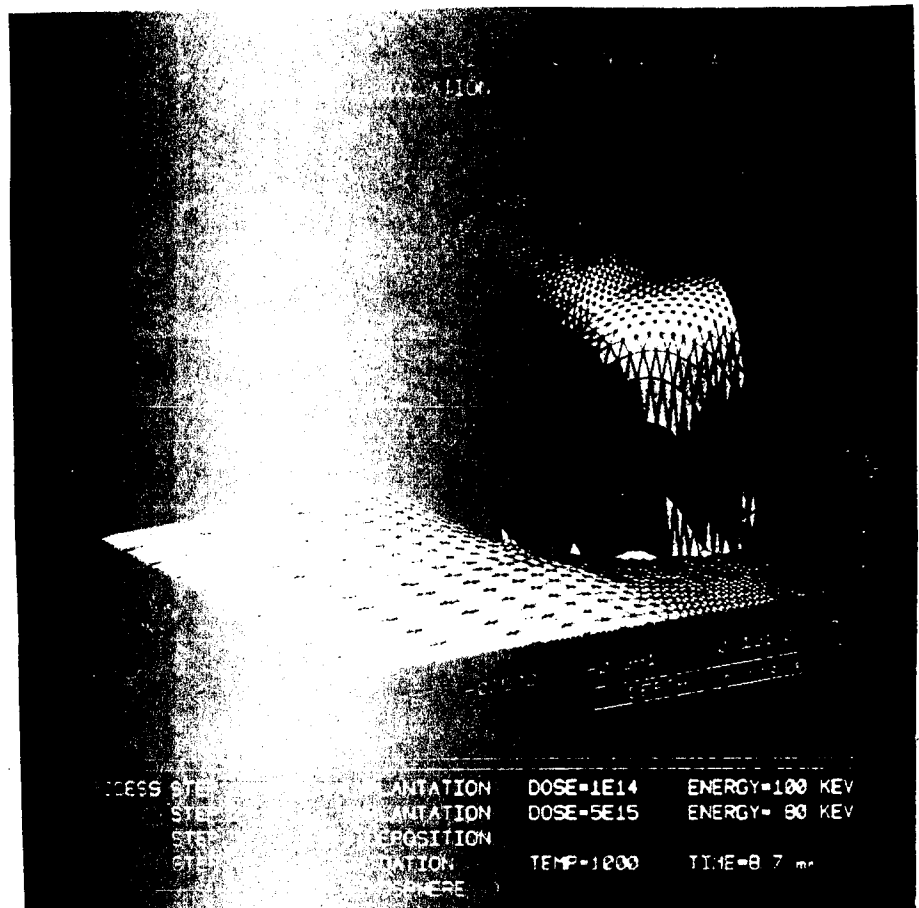


Fig 106

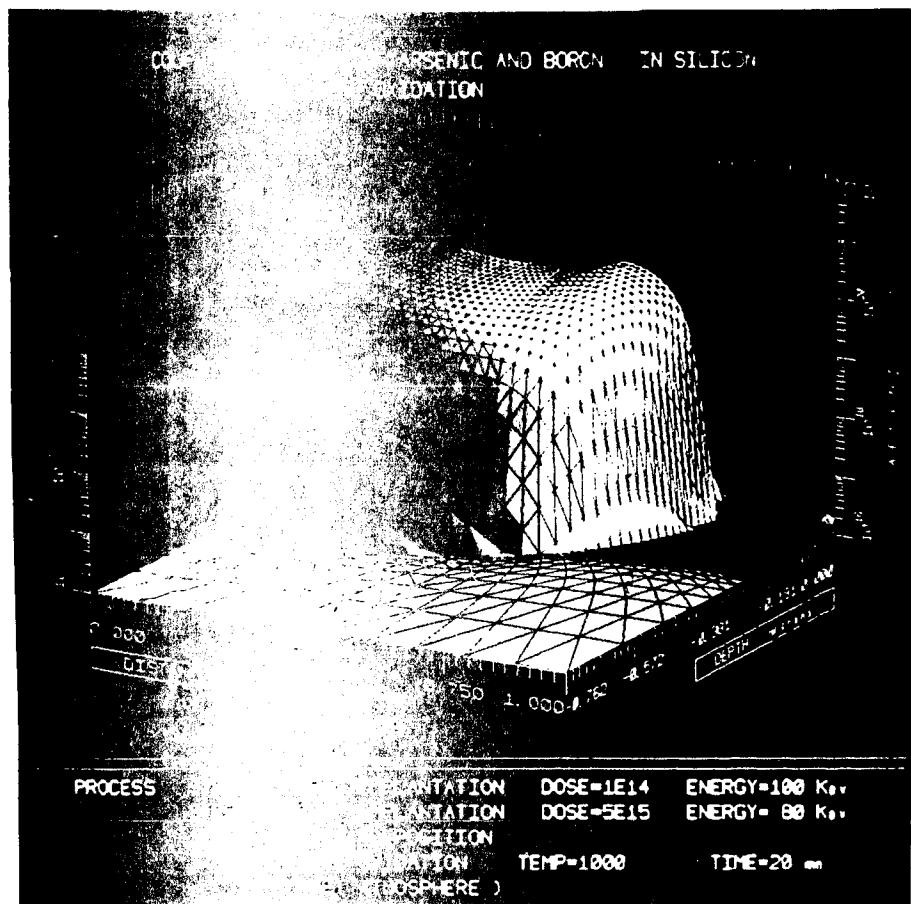


Fig 107

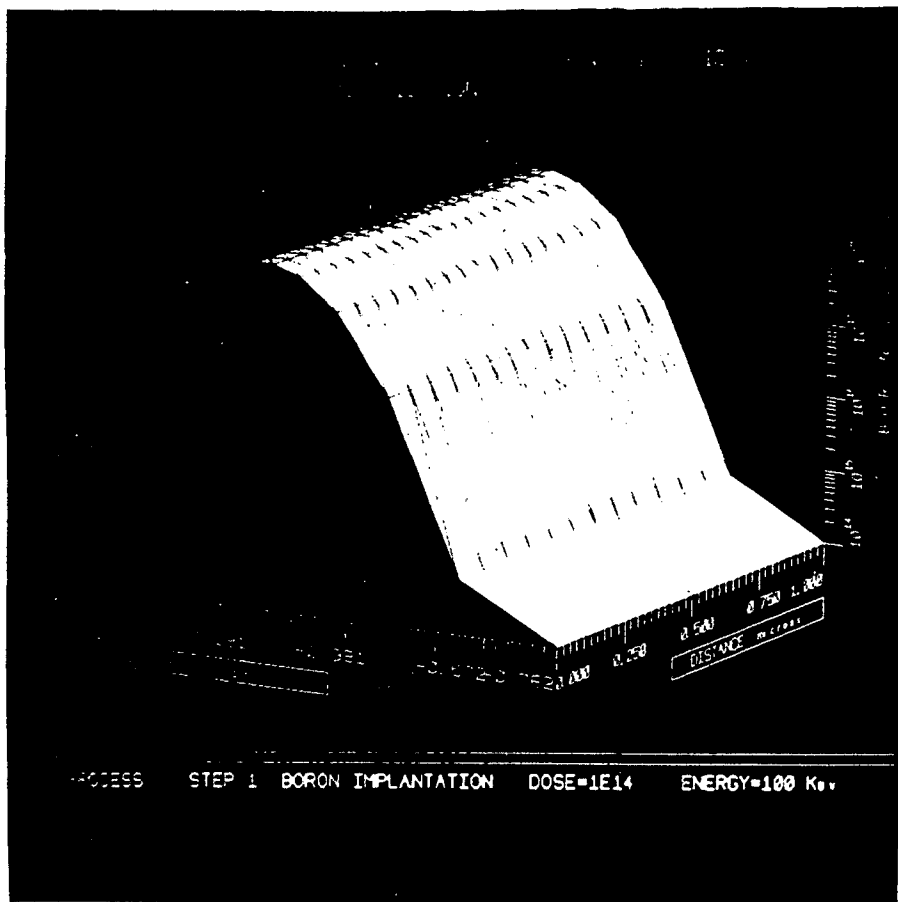


Fig 108

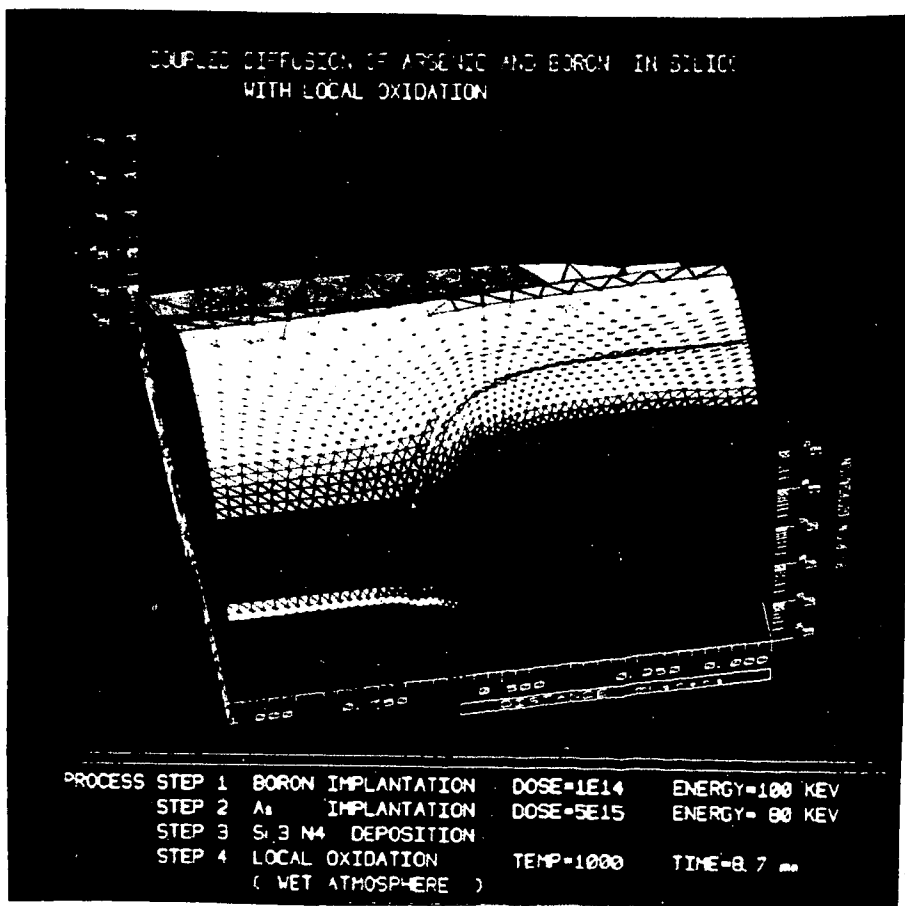


Fig 109

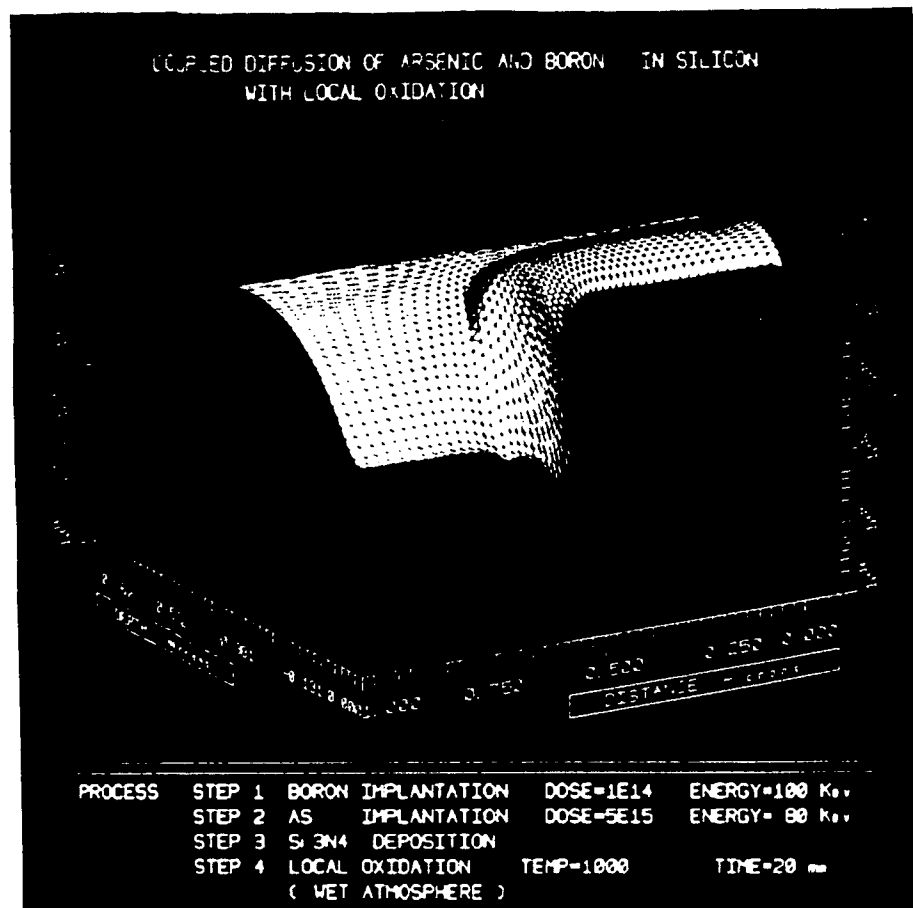


Fig: 440

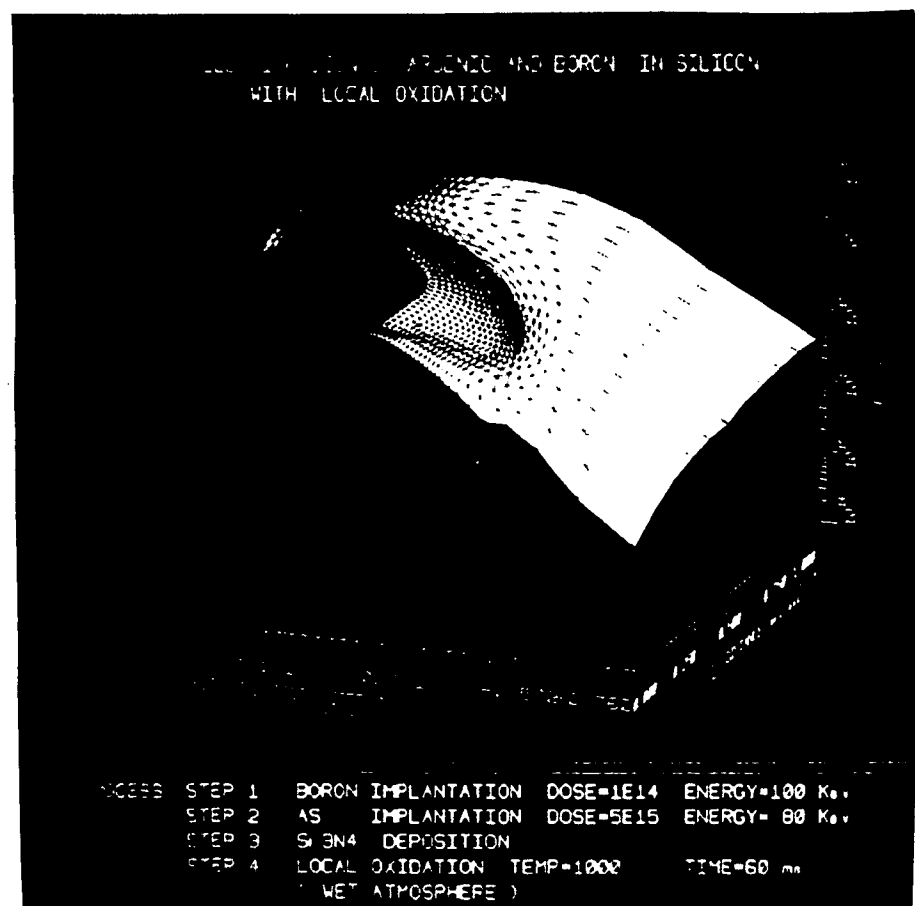


Fig: 444

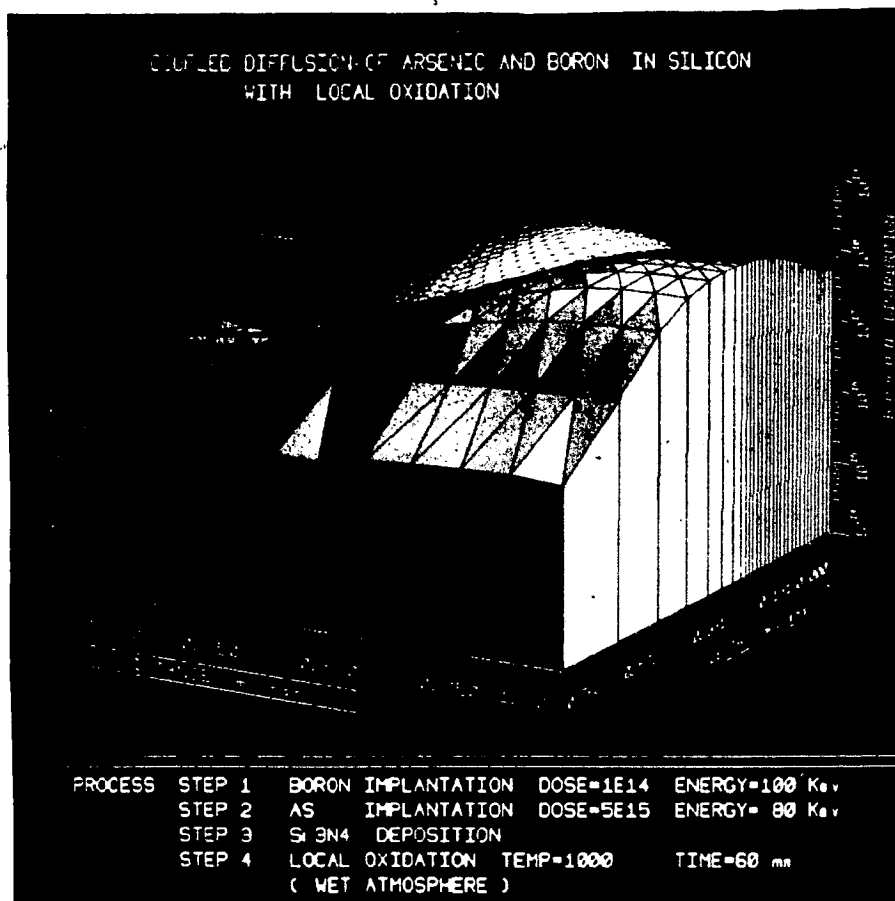


Fig 112

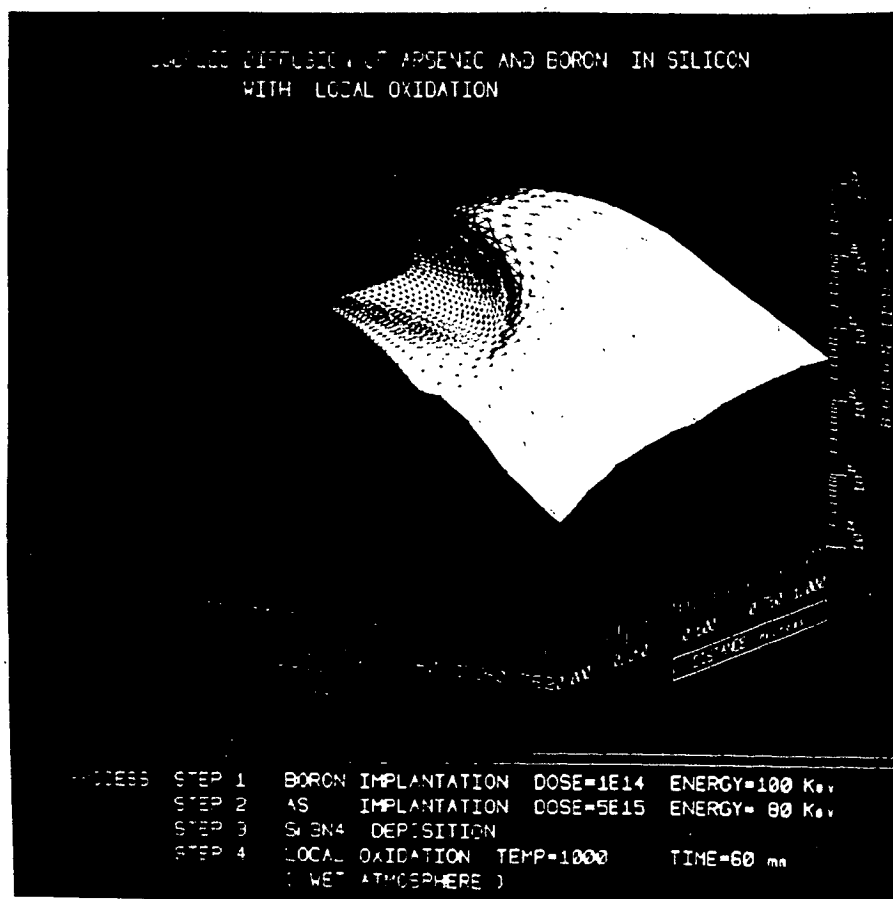


Fig 113

V - QUELQUES INDICATIONS SUR L'IMPLANTATION IONIQUE ET SUR L'ETUDE DU COMPORTEMENT ELECTRIQUE (Device modelling)

1. Implantation ionique

Dans les dernières années l'implantation ionique est devenue une technique importante de dopage pour les circuits intégrés, et spécialement dans les circuits V.L.S.I. qui seraient impensables sans cette implantation ionique.

- l'implantation ionique produit des concentrations en dopants homogènes et reproductibles

- l'implantation ionique est bien adaptée à la technologie planar pour le silicium. Les couches d'oxyde utilisées pour faire barrière à la diffusion peuvent être utilisées pour masquer le faisceau ionique. De plus l'implantation ionique peut être réalisée à travers de fines couches de passivation (telles que SiO_2 , Si_3N_4 (nitrures)) ou par l'utilisation de masques photorésistants.

- l'implantation ionique est un processus basse température (bien qu'une étape de redistribution est habituellement nécessaire pour recristalliser le réseau endommagé).

Du point de vue théorique il faut "mettre en équations" l'interaction d'un faisceau d'ions avec la matière. Il s'agit d'un problème de chocs multiples d'une particule avec

- les ions du réseau cristallin
- les électrons libres du cristal.

Chaque fois qu'un ion rentre en collision avec une de ces cibles il perd de l'énergie et sa trajectoire est déviée. On a donc un procédé de marche aléatoire et on peut voir sur la figure 114 un schéma des différents phénomènes pouvant se produire entre une particule chargée et une cible.

Le phénomène à simuler est donc un phénomène de transport ce qui n'est pas toujours aisé du point de vue pratique.

L'expérience montre que le faisceau pénètre au tout premier ordre jusqu'à une profondeur R ou "range" avec une certaine dispersion λ (voir figure 115).

L'idée est alors venue de décomposer soit un profil expérimental (1D - car il est difficile de mesurer des profils 2D), soit des résultats de simulations Monté-Carlo sur ses moments d'ordre 1, 2, 3 ou 4 dans la profondeur et de même les moments d'ordre 2, 3 dans la direction perpendiculaire.

(théorie L.S.S. développée par LINDHARD, SCHARFF et SCHIOTT)

Il existe des tables de référence de ces moments dans la littérature.

Une fois ces moments calculés comme des moyennes

(p. exemple $R = \int_0^{\infty} C(x) dx$, ...), il faut trouver une fonction qui possède les mêmes moments, et satisfasse aussi certaines conditions physiques (positivité,...).

Si l'on se contente des deux premiers moments (range et déviation standard) on aboutit alors à une Gaussienne. C'est cette approximation que nous avons utilisée dans nos simulations numériques précédentes (calcul de la distribution des concentrations d'impuretés, utilisées comme condition initiale pour la redistribution).

Il existe dans la littérature des approximations analytiques plus précises (prenant en compte des moments d'ordre supérieurs), telles que la PEARSON IV, l'Edgeworth., etc.

2 - Exemple de calcul analytique

Nous donnons ici une formule permettant de calculer la distribution des impuretés après implantation ionique à travers un masque de forme arbitraire.

On donne sur la figure 116, le système de coordonnées usuels. La direction du faisceau d'ions est normale à la surface. La coordonnée z donne la profondeur dans la cible ; la valeur de la coordonnée z représentant la valeur maximum de la distribution d'ions est R_p ("range" projeté moyen ou parcours projeté sur la direction du faisceau d'ions incident). Les déviations standard de la distribution en x, y et z sont notées par $\Delta X, \Delta Y, \Delta R_p$.

Sous les hypothèses suivantes :

i) Suivant Furukawa (Japan J. Appl. Physics 11,134 (1972)), on suppose qu'un ion entrant dans la cible au point (0,0,0) atteindra le point (x, y, z) avec la probabilité (distribution Gaussienne)

$$(1) \quad f(x, y, z) = \frac{1}{(2\pi)^{1.5} \Delta R_p \Delta X \Delta Y} \exp \left(-\frac{x^2}{2\Delta X^2} - \frac{y^2}{2\Delta Y^2} - \frac{(z - R_p)^2}{2\Delta R_p^2} \right)$$

On a en général $\Delta X = \Delta Y$; les valeurs pour $R_p, \Delta R_p$ et ΔX ont été calculées par différents auteurs et ont été tabulées.

ii) On suppose que le pouvoir d'arrêt du matériau masquant est égal au pouvoir d'arrêt du semiconducteur (cela est assez bien vérifié pour le silicium et oxyde de silicium).

Par la suite, le point où l'ion traversera la surface de la cible sera noté par (ξ, η, ζ) . En supposant que l'on ait un faisceau d'ions homogène, le nombre d'ions $N(\xi, \eta, \zeta)$ traversant la surface au point (ξ, η, ζ) peut s'écrire

$$(2) \quad N(\xi, \eta, \zeta) = N_0 \delta(\zeta - d_{ox}(\xi))$$

avec N_0 courant (flot) ionique parallèle à la normale à la surface.

$d_{ox}(\xi)$ décrit la forme du masque et δ est la fonction de Dirac.

La contribution de l'ion entrant au point (ξ, η, ζ) à la distribution globale au point (x, y, z) est donnée par

$$(3) \quad f(x-\xi, y-\eta, z-\zeta)$$

avec f donnée par (1).

La distribution finale de tous les ions implantés, que l'on notera $F(x, y, z)$ est obtenue par intégration sur tous les ξ, η, ζ , c'est à dire

$$(4) \quad F(x, y, z) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} N(\xi, \eta, \zeta) f(x-\xi, y-\eta, z-\zeta) d\xi d\eta d\zeta$$

En remplaçant f et N par leurs valeurs et en intégrant en η et ζ on obtient

$$F(x, y, z) = \frac{N_0}{2\pi \Delta X \Delta R_p} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{(x-\xi)^2}{2\Delta X^2} - \frac{(z-d_{ox}(\xi)-R_p)^2}{2\Delta R_p^2}\right) d\xi$$

Le maximum de la distribution est donné par

$$F_{max} = \frac{N_0}{\sqrt{2\pi} \Delta R_p}$$

d'où

$$(5) \quad \frac{F(x, y, z)}{F_{max}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \Delta X} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{(x-\xi)^2}{2\Delta X^2} - \frac{(z-d_{ox}(\xi)-R_p)^2}{2\Delta R_p^2}\right) d\xi$$

On peut inclure dans ce résultat le cas de marches abruptes lors de la définition du masque. Si on suppose que les bords du masque ont pour abscisse $x = \pm a$, on a alors

$$d_{ox}(\xi) = 0 \quad \text{si} \quad |\xi| < a$$

$$d_{ox}(\xi) = d_{ox} \quad \text{si} \quad |\xi| \geq a$$

On décompose alors l'intégrale (5) en deux parties et cela donne

$$(6) \quad \frac{F(x, y, z)}{F_{max}} = \exp\left(-\frac{(z - R_p)^2}{2 \Delta R_p^2}\right) \frac{1}{\sqrt{2\pi} \Delta x} \int_{-a}^a \exp\left(-\frac{(x - \xi)^2}{2 \Delta x^2}\right) d\xi \\ + \exp\left(-\frac{(z - d_{ox} - R_p)^2}{2 \Delta R_p^2}\right) \frac{2}{\sqrt{2\pi} \Delta x} \int_{-\infty}^a \exp\left(-\frac{(x - \xi)^2}{2 \Delta x^2}\right) d\xi$$

3 - Quelques indications sur le "device modelling"

Les études numériques concernant la fabrication des circuits intégrés se situent logiquement en amont des études relatives au "device modelling", c'est à dire à l'étude des caractéristiques électriques des composants élémentaires de circuits tels que le transistor MOS.

Les résultats des études relatives à la simulation numérique des différentes étapes technologiques de la fabrication, tels que la forme (aspect géométrique) des différents éléments, (silicium, oxydes, poly-cristaux, contacts, etc...), la distribution des différentes impuretés (acceptrices, donatrice) constituant le dopage du transistor, servent de point de départ (données initiales) pour l'étude du comportement électrique du composant considéré.

Les résultats des études numériques relatives au "device modelling", (essentiellement caractéristiques électriques) serviront eux, de base dans l'analyse des circuits (CAO)

1 - Equations fondamentales

Les équations donnant le potentiel électrostatique ψ , la répartition des électrons n et celle des trous p , dans le modèle hydrodynamique sont les suivantes:

a - Equation de Poisson

$$(7) \quad -\nabla \cdot (\epsilon \nabla \psi) = -q (n - p - D_{op})$$

b - Equations de continuité pour les électrons et les trous

$$(8) \quad \frac{\partial n}{\partial t} = (G - R) + \frac{1}{q} \nabla \cdot \vec{J}_n$$

$$(9) \quad \frac{\partial p}{\partial t} = (G - R) - \frac{1}{q} \nabla \cdot \vec{J}_p$$

ou \vec{J}_n et \vec{J}_p sont les vecteurs densité de courant pour les électrons et les trous respectivement. Il sont donnés par :

$$(10) \quad \vec{J}_n = q \left(\mu_n n \vec{E} + D_n \vec{\nabla} n \right)$$

$$(11) \quad \vec{J}_p = q \left(\mu_p p \vec{E} - D_p \vec{\nabla} p \right)$$

avec

Ψ : potentiel électrostatique

ϵ : permittivité du matériau

q : charge de l'électron

n : densité d'électrons

p : densité de trous

$Dop = N_A - N_D$ est le profil de dopage (densité d'impuretés ionisées)

N_A : accepteurs type.p

N_D : donneurs type.n

(G-R) est le terme de generation-recombinaison

μ_n, μ_p mobilités des électrons et des trous

D_n, D_p coefficients de diffusion des électrons et des trous

$\vec{E} = -\vec{\nabla}\Psi$ est le champ électrique

A l'ensemble des équations (7) (8) (9) il faut bien entendu ajouter conditions initiales sur n et p et conditions aux limites sur Ψ, n et p .

Les conditions aux limites peuvent être du type flux nul (condition de Neumann homogène) ou par exemple sur un

- Contact ohmique

$$(12) \quad \begin{cases} \Psi = V_T \log \frac{n}{n_i} + V_j \\ n - p - Dop = 0 \\ np = n_i^2 \end{cases}$$

ou V_T est le potentiel de Boltzmann et est donné par

$$V_T = \frac{kT}{q}$$

et où V_j est le potentiel extérieur appliqué au contact j et où n_i est la densité intrinsèque d'électrons à la température considérée.

A un contact du type Schottky les conditions aux limites sont données par

$$(13) \quad \begin{cases} \psi = \varphi_s + V_j \\ n = n_i \exp \left(\frac{\varphi_s + V_j}{V_T} \right) \\ p = n_i \exp \left(- \frac{\varphi_s + V_j}{V_T} \right) \end{cases}$$

ou φ_s est une constante dépendant du métal réalisant le contact avec le semi-conducteur.

Différentes variantes de formulations du problème sont possibles suivant que l'on considère ou non le terme de génération-recombinaison, selon que l'on ne s'intéresse qu'à l'état stationnaire ($\frac{\partial n}{\partial t} = 0$ et $\frac{\partial p}{\partial t} = 0$)

Prenons par exemple le cas stationnaire :

Dans le cas où la relation d'Einstein est valide, c'est à dire

$$(14) \quad \frac{D_i}{\mu_i} = \frac{kT}{q} = V_T = \text{constante}$$

On peut définir une nouvelle formulation du problème, en introduisant de nouvelles variables : φ_n, φ_p et V par

$$(15) \quad \begin{cases} n = n_i e^{V + \varphi_n} \\ p = n_i e^{-V + \varphi_p} \\ \psi = V \cdot V_T \end{cases}$$

φ_n et φ_p sont appelés quasi niveaux de Fermi (ou pseudo potentiels de Fermi).

(7), (8), (9) devient alors dans le cas stationnaire

$$(16) \quad \begin{cases} -\nabla \cdot (\epsilon \nabla V) + \frac{q n_i}{V_T} (e^{V + \varphi_n} - e^{-V + \varphi_p}) = \frac{q}{V_T} D_{op} \\ -\nabla \cdot (\mu_n V_T n_i e^{V + \varphi_n} \nabla \varphi_n) - (G - R) = 0 \\ -\nabla \cdot (\mu_p V_T n_i e^{-V + \varphi_p} \nabla \varphi_p) - (G - R) = 0 \end{cases}$$

Les conditions aux limites aux contacts ohmiques deviennent

$$(17) \quad \begin{cases} V = \log \left(\frac{D_{op} + \sqrt{D_{op}^2 + 4n_i^2}}{2n_i} \right) + \frac{V_j}{V_T} \\ \varphi_n = - \frac{V_j}{V_T} \\ \varphi_p = \frac{V_j}{V_T} \end{cases}$$

On peut de même déduire les conditions aux contacts de type Schottky.

On introduit parfois aussi les variables z_n et z_p données par

$$(18) \quad \begin{cases} z_n = e^{\varphi_n} \\ z_p = e^{\varphi_p} \end{cases}$$

Le système (10) s'écrit alors

$$(19) \quad \begin{cases} -\nabla \cdot (\epsilon \nabla V) + \frac{q n_i}{V_T} (z_n e^V - z_p e^{-V}) = \frac{q}{V_T} D_{op} \\ -\nabla (\mu_n V_T n_i e^V \nabla z_n) - (G-R) = 0 \\ -\nabla (\mu_p V_T n_i e^{-V} \nabla z_p) - (G-R) = 0 \end{cases}$$

On déduit aussi les conditions aux limites sur z_n et z_p .

Les problèmes relatifs à la simulation numérique des équations du "device modeling" restent plus difficiles que les problèmes liés à la fabrication des circuits (bien que, par exemple pour la simulation numérique du phénomène de diffusion avec oxydation localisée par exemple, les problèmes pratiques ne soient pas si évident non plus).

Pour certaines configurations, par exemple dans le cas de faibles tensions appliquées, le problème, sous la formulation (16) (quasi niveaux de Fermi), reste dominé par l'équation (16-1), donnant le potentiel V , qui est une équation non linéaire de type elliptique et qui ne pose pratiquement pas de problèmes de résolution (il existe de nombreux algorithmes de résolution).

Par contre, lorsqu'on augmente les tensions appliquées, le couplage entre les trois équations devient plus important et ce couplage détruit les "bonnes propriétés" du système ; les algorithmes qui marchaient très bien dans le cas précédent, on de plus en plus de mal à converger. Les termes de "drift" (relatif au champ électrique E) dans (10) et (11) deviennent prépondérant et cela entraîne du point de vue pratique des couches limites sur les quasi niveau de Fermi φ_n et φ_p , induisant par là même des difficultés numériques.

Selon les méthodes utilisées pour la simulation numérique, on utilisera l'une ou l'autre des trois formulations (7.9) ou (16) ou (19).

Si on néglige les termes de génération recombinaison, dans la formulation (7-9), chaque équation est linéaire en la variable principale, mais les deux équations relatives aux électrons et trous conduisent à un système non symétrique (les systèmes non symétriques posent plus de difficultés pratiques de résolution que les systèmes symétriques).

La formulation (16) conduit elle à un système dont chaque équation est de type elliptique (non linéaire). Il existe des algorithmes efficaces de résolution pour chaque équation, mais la difficulté numérique reste dans le couplage des équations.

Dans la dernière formulation (19), les deux dernières équations deviennent linéaires (de type elliptiques) lorsqu'on ne considère que la variable principale (z_n ou z_p), des difficultés supplémentaires proviennent ici d'overflows et underflows machine lors de l'évaluation de $\frac{\pm v}{e}$.

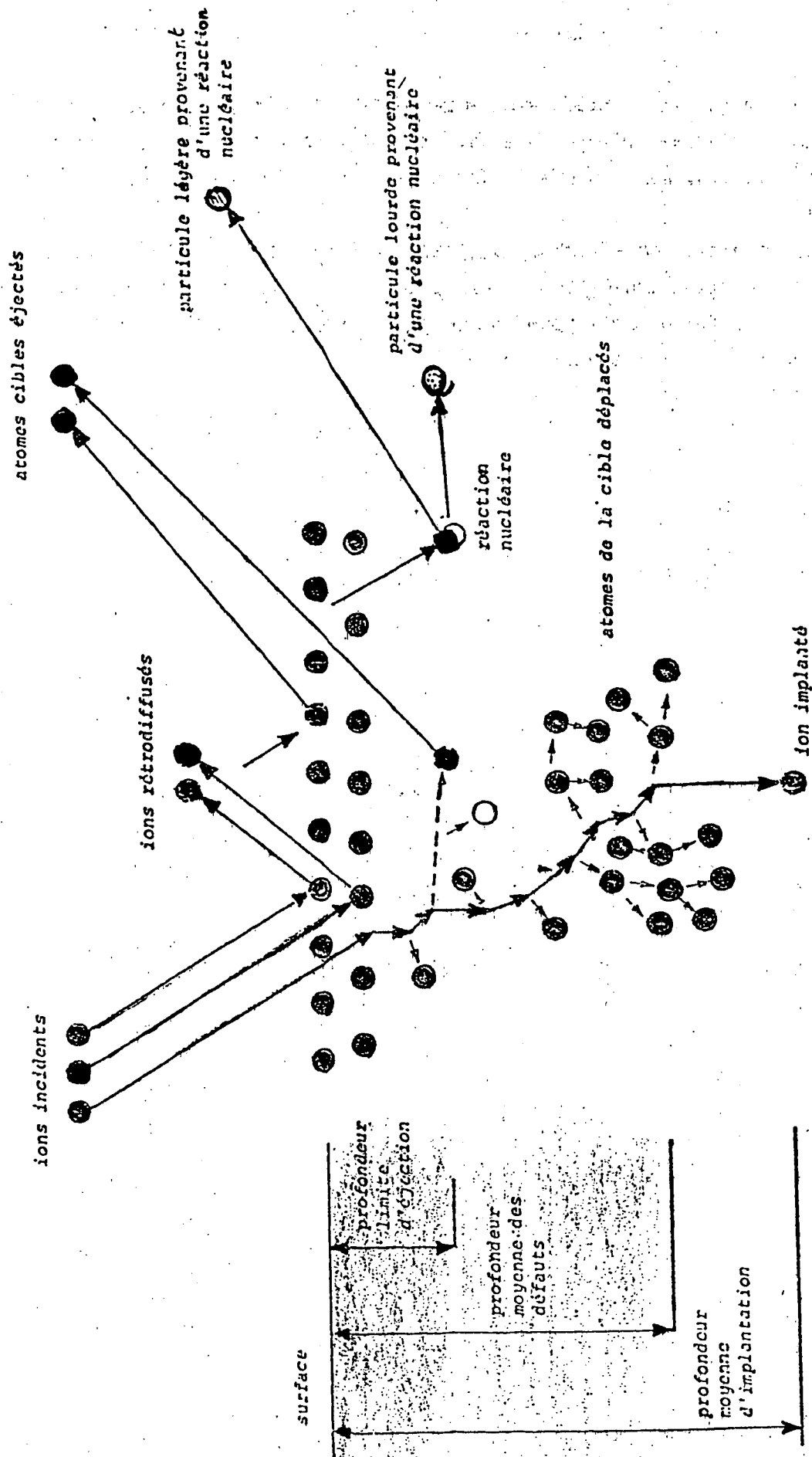


FIGURE 114

Schéma des différents phénomènes pouvant se produire entre une particule chargée et une cible

R Parcours total

-149-

$\overline{R_p}$ Parcours projeté sur la direction
du faisceau d'ions incident

R_{\perp} Parcours projeté sur le plan \perp
à la direction d'incidence

R_C Corde du parcours

Surface
de la cible

Direction
du faisceau incident

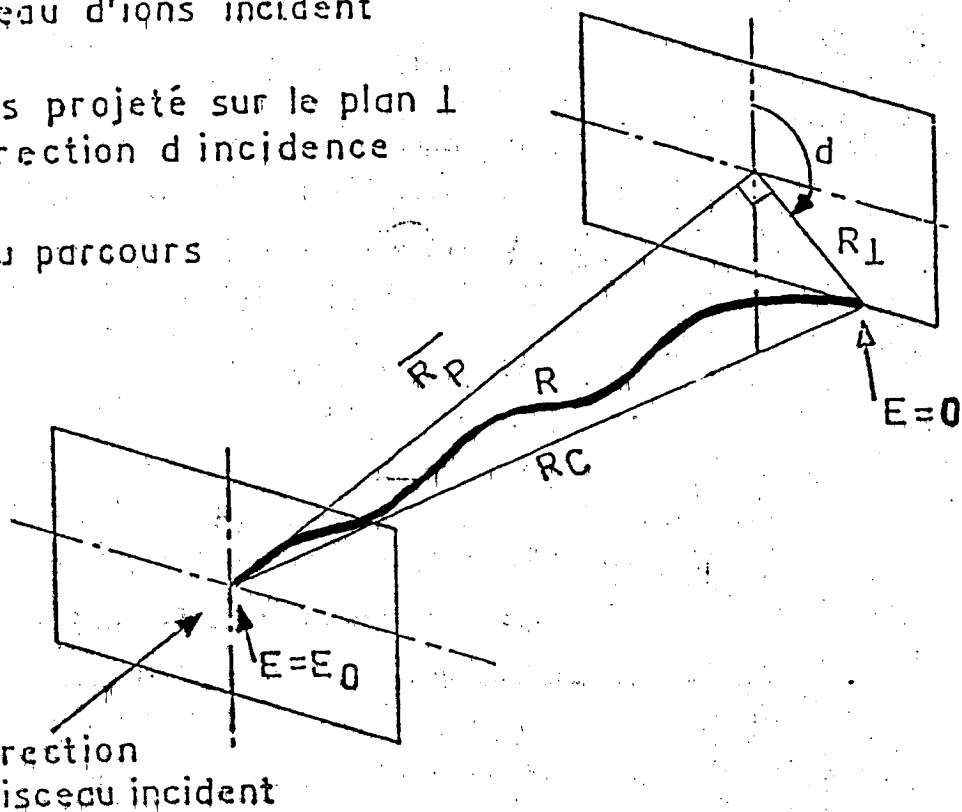


Figure 115

Parcours d'une particule dans un solide

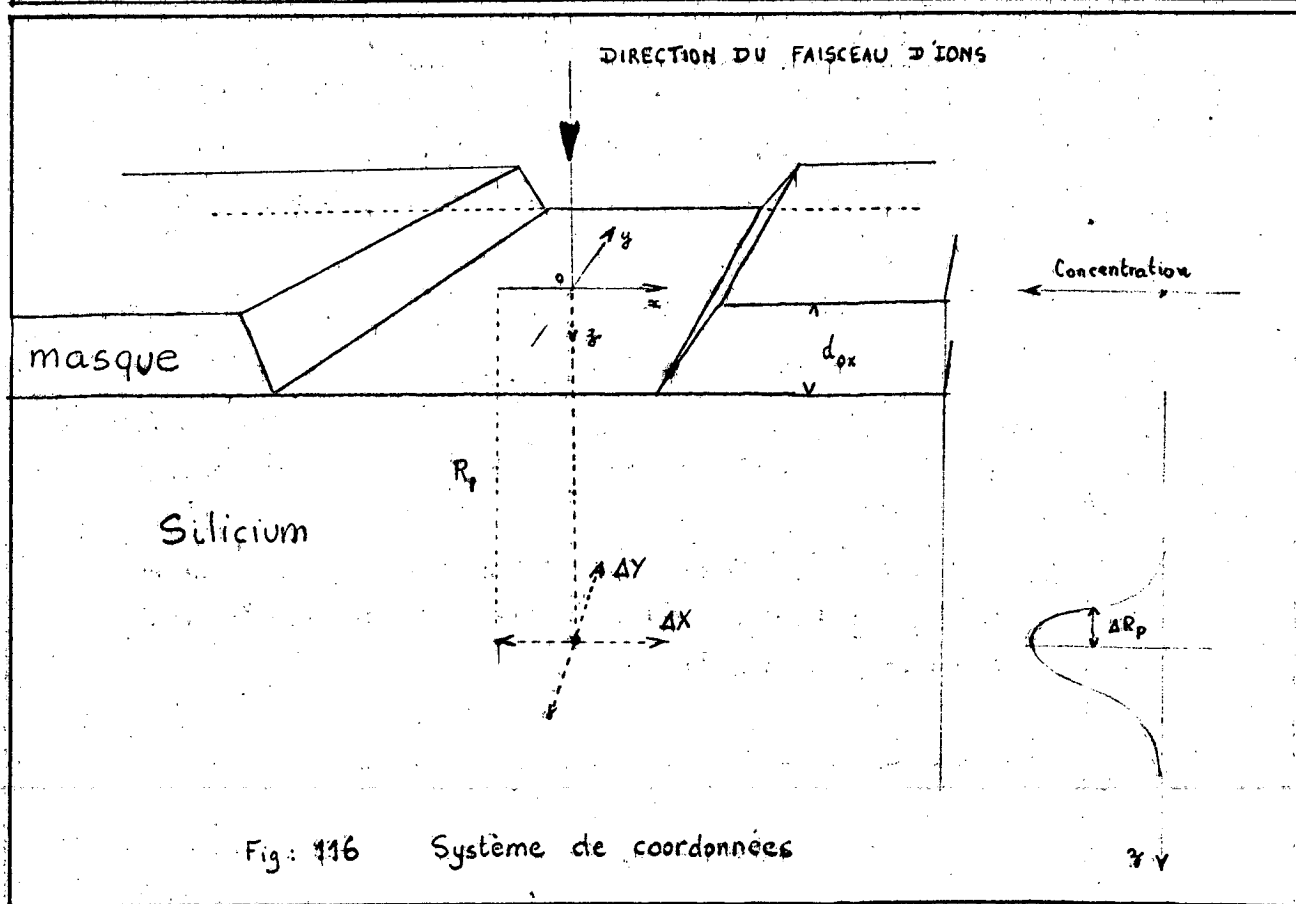


Fig: 116

Système de coordonnées

xy

BIBLIOGRAPHIE

- [1] R. TIELERT : "Two-dimensional Numerical Simulation of Impurity Redistribution in V.L.S.I. Processes", IEEE Trans. on E.D., 27, 8 (1980), pp. 1479-1483.
- [2] W. NUYS, R. VAN OVERSTRAETEN : "Computer Calculation of Impurity Profiles in Silicon", Phys. Stat. (a) 1973, 15 pp, 455-472.
- [3] R. GLOWINSKI-A. MARROCCO : "Finite element approximation and iterative methods of solution for 2-D nonlinear magnetostatic problems" Proceedings of COMPUMAG Conference, Oxford, April 1976, pp, 112-125.
- [4] R. GLOWINSKI : "La méthode de relaxation" Quaderni dei rendiconti di matematica 14, Roma, Istituto Matematica "Guido Castelnuovo", 1971.
- [5] D. VANDORPE : Simulation numérique de la fabrication et du comportement des dispositifs semi-conducteurs, Computing methods in applied sciences and engineering, Lecture Note in Computer Sciences, N° 10, m. 467, Springer-Verlag, 1974.
- [6] J. MONNIER : Thèse docteur ingénieur, Grenoble 1971.
- [7] D.D. Warner, C.L. Wilson : Two dimensional concentration dependent-diffusion Bell system Tech. J., 59, 1, (1980), pp, 1-40.
- [8] S.M. Hu : General theory of impurity diffusion in semi conductors via the vacancy mechanism, Phys. Rev. 180 (1969), pp, 773-784.
- [9] D. Mathiot, J.C. Pfister : Influence of the non equilibrium vacancies on the impurity into silicon (à paraître).
- [10] O.C. Zienkiewicz : The finite element method in engineering Science, Mac Graw Hill, London, 1971.
- [11] P.L. GEORGE : Résolution numérique de problèmes évolutifs, Thèse 3ème cycle, Paris VI, 1980.
- [12] D.A. ANTONIADIS, S.E. HANSEN, R.W. DUTTON : SUPREMM : a program for I.C. process modelling and simulation, Technical report n° 5019-2, Stanford University.
- [13] J.A. GREENFIELD, C.H. PRICE, R.W. DUTTON, Analysis of nonplanar devices Nato Advanced Study Institute on Process and Device Simulation for MOS-VLSI Circuits, Sogesta Urbino, July 12-23, 1982.

- [14] E. CAQUOT, A. MARROCCO, Numerical simulations with finite elements of nonlinear impurity diffusion in silicon. NASECODE II (1981)
- [15] E. CAQUOT, E. FERNANDEZ-CARA, A. MARROCCO, Résolution numérique d'un problème non linéaire lié à la diffusion d'impuretés dans du silicium. Proceeding of 5th International Symposium on computing methods in applied sciences and engineering, Versailles, dec. 14-18, 1981.
- [16] M. KUMP, R.W. DUTTON, Two dimensional process simulation, Supra, Nato advanced Study Institute on Process and Device Simulation for MOS-VLSI Circuits, Sogesta Urbino, July 12-23, 1982.
- [17] H.K. GUMMEL, A self-consistent iterative scheme for one dimensional Steady State transistor calculations, I.E.E.E. Transaction on electron device, 1964, pp. 455-465.
- [18] E. FERNANDEZ CARA, A nonlinear diffusion problem arising in semiconductor process modelling with a singularity, Research Report, INRIA, n° 174 novembre 1982.
- [19] J.L. LIONS, Perturbations singulières dans les problèmes aux limites et en contrôle optimal, Lecture Notes in Mathematics, N° 323, Springer-Verlag.
- [20] R. GLOWINSKI, Q.V. DINH, J. PERIAUX, Domain decomposition methods for nonlinear problems in fluid dynamics, Research Report, INRIA, N° 147, July 1982.
- [21] E. CAQUOT, E. FERNANDEZ CARA, A. MARROCCO. 2-D simulation of coupled diffusion and segregation of impurities in V.L.S.I. process using finite elements. Joint SIAM-IEEE Conference on numerical simulation of V.L.S.I. devices, Boston nov 1982.
- [22] B.R. PENUALLI. Lateral oxydation and redistribution of dopants 2nd Int. Conference on numerical Analysis of semiconductor device and ICS (NASECODE II). Dublin, Ireland, June 17-19. 1981.
- [23] R. TIELERT. Numerical simulation of impurity redistribution near mask edges. NATO advanced study institute on Process and device simulation for MOS-VLSI Circuits SOGESTA - Urbino July 12-23, 1982.
- [24] E. CAQUOT, Two dimensional simulation of local oxidation in V.L.S.I. processes JOINT. SIAM-IEEE Conference on numerical simulation of V.L.S.I. devices, Boston nov. 1982.

- [25] A. PONCET, Finite Element simulation of local oxidation of silicon. Presented at the summer course on V.L.S.I. process and device modeling ; Heverlee, Belgium, June 7-10, 1983.
- [26] B.E. DEAL, A.S. GROVE. General relationship for the thermal oxidation of silicon. J. Appl. Phys., Vol 36, pp. 3770-3778, (1965).
- [27] T.C. WU, W.T. STACY and K.N RITZ. The influence of the LOCOS processing parameters on the shapes of the bird's beak structure. J. Electrochem SOC 130,7 (1983).
- [28] R.B. FAIR and J.C.C. TSAI, Theory and direct measurements of BORON segregation in SiO₂, during dry, near dry and Wet O₂ oxidation J. Electrochem. Soc. 125,12 (1978).
- [29] A. MARROCCO, O. PIRONNEAU. Optimum design with Lagrangian Finite Elements : design of an electromagnet COMP. METHODS IN APPLIED SCIENCES AND ENGINEERING 15 (1978) 277-308.
- [30] A.J. STROUD., Approximate calculation of multiple integrals Prentice Hall 1971.

ANNEXE 1.

Calcul d'une primitive du coefficient de diffusion

$$D(u) = \alpha \left[1 + \frac{\beta}{2} (u-c + \sqrt{(u-c)^2 + 4}) \right] \left[1 + \frac{u}{\sqrt{(u-c)^2 + 4}} \right]$$

$$= \alpha \left[1 + \beta \left(\frac{u-c}{2} + \sqrt{\left(\frac{u-c}{2}\right)^2 + 1} \right) \right] \left[1 + \frac{u}{2\sqrt{\left(\frac{u-c}{2}\right)^2 + 1}} \right]$$

$$Y(u) = \int_0^u D(x) dx, \quad \text{On va en fait calculer une primitive de } D$$

$$\text{On pose } v = \frac{u-c}{2} \Rightarrow dv = \frac{du}{2}$$

$$2\alpha \int \left(1 + \beta (v + \sqrt{v^2 + 1}) \right) \left(1 + \frac{2v+c}{2\sqrt{v^2 + 1}} \right) dv$$

$$sh(r) = v \Rightarrow dv = ch(r) dr$$

$$2\alpha \int 1 + \beta (sh(r) + ch(r)) \left(1 + \frac{2sh(r)+c}{2ch(r)} \right) ch(r) dr$$

$$\alpha \int (1 + \beta e^2) (2e^2 + c) dr$$

$$\text{On obtient donc pour primitive : } \alpha \left[cr + (\beta c + 2) e^2 + \beta e^{22} \right]$$

Retour variable v

$$\alpha \left[c \log(v + \sqrt{v^2 + 1}) + (\beta c + 2)(v + \sqrt{v^2 + 1}) + \beta (v + \sqrt{v^2 + 1})^2 \right]$$

Si on revient à la variable initiale u

$$\alpha \left[c \log \left(\frac{u-c}{2} + \sqrt{\left(\frac{u-c}{2}\right)^2 + 1} \right) + (\beta c + 2) \left(\frac{u-c}{2} + \sqrt{\left(\frac{u-c}{2}\right)^2 + 1} \right) + \right.$$

$$\left. \beta \left(\frac{u-c}{2} + \sqrt{\left(\frac{u-c}{2}\right)^2 + 1} \right)^2 \right]$$

ANNEXE 2

Calcul de la dérivée du coefficient de diffusion dans le cas de diffusion d'une impureté

$$D(x) = \frac{D_i}{1+\beta} \left[1 + \frac{\beta}{2} (x-y + \sqrt{(x-y)^2 + 4}) \right] \left[1 + \frac{x}{\sqrt{(x-y)^2 + 4}} \right]$$

En appliquant les formules classiques de dérivation

$$D'(x) = \frac{D_i}{1+\beta} \left[\frac{\beta}{2} \left(1 + \frac{x-y}{\sqrt{(x-y)^2 + 4}} \right) \left(1 + \frac{x}{\sqrt{(x-y)^2 + 4}} \right) + \right. \\ \left. \left(1 + \frac{\beta}{2} (x-y + \sqrt{(x-y)^2 + 4}) \right) \left(\frac{\sqrt{(x-y)^2 + 4} - x \frac{x-y}{\sqrt{(x-y)^2 + 4}}}{(x-y)^2 + 4} \right) \right]$$

En regroupant certains termes on obtient

$$\frac{D_i}{1+\beta} \left[\frac{\beta}{2} \left(1 + \frac{x-y}{\sqrt{(x-y)^2 + 4}} \right) \left[2 - \frac{x(x-y)}{(x-y)^2 + 4} + \frac{x}{\sqrt{(x-y)^2 + 4}} \right] + \frac{1}{\sqrt{(x-y)^2 + 4}} \left(1 - \frac{x(x-y)}{(x-y)^2 + 4} \right) \right]$$

Que l'on peut aussi écrire

$$\frac{D_i}{1+\beta} \cdot \frac{1}{\sqrt{(x-y)^2 + 4}} \left[(2\beta N + 1) + \frac{x(2\beta - (x-y))}{(x-y)^2 + 4} \right]$$

si on pose

$$N = \frac{1}{2} \left(x-y + \sqrt{(x-y)^2 + 4} \right)$$

Dans le cas ou on prend en compte le clustering, le coefficient de diffusion equivalent est donné par

$$D(c) = D(x) \frac{dx}{dc}$$

et donc le calcul de la dérivée $D'_c(c)$ s'effectuera par

$$D'_c(c) = D(x) \frac{d^2x}{dc^2} + D'_x(x) \left(\frac{dx}{dc} \right)^2$$

ou rappelons-le, la concentration effective X est donnée en fonction de la concentration C par

$$X(c) = \frac{c}{\left[1 + \left(\frac{c}{NM} \right)^4 \right]^{1/4}}$$

$D'_x(x)$ a été calculé précédemment

Après différents calculs on trouve

$$X'_c = \frac{dx}{dc} = \frac{1}{\left(1 + \left(\frac{c}{NM} \right)^4 \right)^{1/4 + 1}}$$

et

$$X''_c = \frac{d^2x}{dc^2} = - \frac{(d+1)}{NM} \left(\frac{c}{NM} \right)^{d-1} \cdot \frac{X'_c}{1 + \left(\frac{c}{NM} \right)^4}$$

ANNEXE 3

Calcul des différentes dérivées de coefficients intervenant dans la diffusion couplée.

On doit évaluer :

$$D'_{11,x}(x,y) \quad D'_{11,y}(x,y)$$

$$D'_{12,x}(x,y) \quad D'_{12,y}(x,y)$$

où les $D_{ij}(x,y)$ sont donnés en II,(2.6)

$D'_{11,x}(x,y)$ a déjà été calculé pour la simulation pour une impureté diffusante (Ann. 2)

En reprenant les mêmes notations que dans l'annexe 2, on trouve

$$D'_{11,y}(x,y) = \frac{D_i}{1+\beta} \frac{1}{\sqrt{(x-y)^2+4}} \left[\frac{x[(x-y)-2\beta]}{(x-y)^2+4} - \beta N \right]$$

$$D'_{12,x}(x,y) = -\frac{D_i}{1+\beta} \frac{1}{\sqrt{(x-y)^2+4}} \left[\frac{x[2\beta-(x-y)]}{(x-y)^2+4} + \beta N + 1 \right]$$

$$D'_{12,y}(x,y) = -\frac{D_i}{1+\beta} \frac{1}{\sqrt{(x-y)^2+4}} \left[\frac{x[(x-y)-2\beta]}{(x-y)^2+4} \right]$$

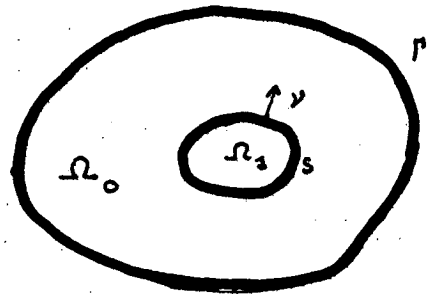
ANNEXE 4

Principe de la méthode des perturbations singulières pour les problèmes raides. (d'après [19])

Soient Ω_0 et Ω_1 deux ouverts de \mathbb{R}^2

S désigne la frontière commune
à Ω_0 et Ω_1 ,

Γ la partie restante de
la frontière



On considère le PROBLEME DE TRANSMISSION suivant.

On cherche une fonction u_0 (resp u_1) définie dans

Ω_0 (resp Ω_1) telle que

$$(1) \quad \begin{cases} -\Delta u_0 = f_0 & \text{dans } \Omega_0 \\ -\varepsilon \Delta u_1 = f_1 & \text{dans } \Omega_1 \end{cases}$$

ou f_i est donnée dans Ω_i .

avec de plus

$$(2) \quad u_0 = 0 \quad \text{sur } \Gamma$$

et les conditions de transmission sur S

$$(3) \quad \begin{cases} u_0 = u_1 \\ \frac{\partial u_0}{\partial \nu} = \varepsilon \frac{\partial u_1}{\partial \nu} \end{cases}$$

ν désignant la normale à S (orientée vers l'extérieur de Ω_1)

Pour résoudre (1), (2), (3) on utilise la méthode variationnelle.

On pose $\Omega = \bar{\Omega}_1 \cup \Omega_0$

et pour $\forall u, v \in H^1(\Omega)$

$$\left(H^1(\Omega) = \left\{ v \mid v \in L^2(\Omega), \frac{\partial v}{\partial x_i} \in L^2(\Omega) \quad \forall i \right\} \right)$$

on pose:

$$\begin{aligned} (4) \quad a_i(u, v) &= \int_{\Omega_i} \text{grad } u \cdot \text{grad } v \, dx & (i=0,1) \\ &= \int_{\Omega_i} \sum_j \frac{\partial u}{\partial x_j} \frac{\partial v}{\partial x_j} \, dx \end{aligned}$$

$$(5) \quad f = f_i \quad \text{dans } \Omega_i \quad i=0,1$$

et on suppose que $f \in L^2(\Omega)$.

On introduit

$$V = H_0^1(\Omega) = \left\{ v \mid v \in H^1(\Omega), \quad v=0 \text{ sur } \Gamma \right\}$$

Alors le problème (1) (2) (3) équivaut à la recherche de $u = u_\varepsilon \in V$ solution de

$$(6) \quad a_0(u_\varepsilon, v) + \varepsilon a_1(u_\varepsilon, v) = (f, v) \quad \forall v \in V$$

avec $u_i =$ restriction de u_ε à Ω_i $(i=0,1)$

Il est classique de montrer que le problème (6) admet une solution unique, car la forme bilinéaire symétrique

$$\Pi(u, v) = a_0(u, v) + \varepsilon a_1(u, v)$$

définit un produit scalaire équivalent à celui de $H^1(\Omega)$

Comme u_ε n'a pas en général de limite dans V lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$, on va chercher un développement du type

$$(7) \quad u_\varepsilon = \frac{u^{-1}}{\varepsilon} + u^0 + \varepsilon u^1 + \dots + \varepsilon^j u^j + \dots$$

On porte (7) dans (6) et on identifie les puissances de ε ; on est conduit à

$$(8) \quad a_0(u^{-1}, v) = 0 \quad \forall v \in V$$

$$(9) \quad a_1(u^{-1}, v) + a_0(u^0, v) = (f, v) \quad \forall v \in V$$

$$(10) \quad a_1(u^{j-1}, v) + a_0(u^j, v) = 0 \quad \forall v \in V$$

$j=1, 2, \dots$

Si on introduit un sous espace $Y_0 \subset V$ tel que

$$a_0(v, v) = 0 \quad \forall v \in Y_0$$

(cela entraîne aussi que $a_0(u, v) = 0 \quad \forall v \in Y_0$ si $u \in Y_0$)

Alors pour que (8) soit vérifiée, il suffit que $u^{-1} \in Y_0$.
Par restriction de (9) (et (10)) à Y_0 on obtient

$$(11) \quad a_1(u^{-1}, v) = (f, v) \quad \forall v \in Y_0$$

$$(12) \quad a_1(u^j, v) = 0 \quad \forall v \in Y_0, \quad j = 0, 1, \dots$$

On est finalement conduit aux formules suivantes

$$(13) \quad \begin{cases} u^{-1} \in Y_0 \\ a_1(u^{-1}, v) = (f, v) \end{cases} \quad \forall v \in Y_0$$

$$(14) \quad \begin{cases} a_0(u^0, v) = (f, v) - a_1(u^{-1}, v) \\ a_1(u^0, v) = 0 \end{cases} \quad \begin{array}{l} \forall v \in V, u^0 \in V \\ \forall v \in Y_0 \end{array}$$

$$(15) \quad \begin{cases} a_0(u^j, v) = -a_1(u^{j-1}, v) \\ a_1(u^j, v) = 0 \end{cases} \quad \begin{array}{l} \forall v \in V, u^j \in V \\ \forall v \in Y_0, \quad j = 1, 2, \dots \end{array}$$

Les formules (13), (14), (15) définissent $u^{-1}, u^0, u^1, \dots, u^r$ de manière unique.

Si nous détaillons ces résultats sur le problème de transmission présenté au début.

$$Y_0 = \left\{ v \mid v \in H_0^1(\Omega) \quad , \quad v = 0 \text{ sur } \Omega_0 \right\}$$

$$\left(\begin{array}{l} \text{Si } a_0(v, v) = 0 \Rightarrow \frac{\partial v}{\partial x_i} = 0 \text{ sur } \Omega_0 \text{ donc } v = \text{cte} \\ \text{puisque } v = 0 \text{ sur } \Gamma \Rightarrow v = 0 \text{ sur } \Omega_0 \end{array} \right)$$

On prendra évidemment $V = H_0^1(\Omega)$
 On explicite les problèmes (13), (14), (15)

a) Calcul de \bar{u}^{-1}

De manière générale on notera g_i la restriction de g à Ω_i ($i=0,1$).

On a, puisque $\bar{u}^{-1} \in Y_0$

$$(16) \quad u_0^{-1} = 0$$

la 2^{ème} équation (13) équivaut à

$$(17) \quad \begin{cases} \bar{u}_1^{-1} \in H_0^1(\Omega_1) \\ -\Delta \bar{u}_1^{-1} = f_1 \quad \text{dans } \Omega_1 \end{cases}$$

C'est le problème de Dirichlet homogène dans Ω_1

b) Calcul de u^0

Si $v \in H_0^1(\Omega)$ on déduit de (17) par application formelle de la formule de Green (qui peut se justifier (cf LIONS-MAGENES))

$$(18) \quad - \int_S \frac{\partial \bar{u}_1^{-1}}{\partial \nu} v \, ds + a_1(\bar{u}_1^{-1}, v) = \int_{\Omega_1} f_1 v \, dx$$

de telle sorte que la 1^{ère} équation de (14) équivaut à

$$(19) \quad a_0(u^0, v) = \int_{\Omega_0} f_0 v \, dx - \int_S \frac{\partial u^0}{\partial \nu} v \, ds \quad \forall v \in H_0^1(\Omega)$$

ce problème (19) équivaut à son tour à

$$(20) \quad \begin{cases} -\Delta u^0 = f_0 & \text{dans } \Omega_0 \\ u^0 = 0 & \text{sur } \Gamma \\ \frac{\partial u^0}{\partial \nu} = \frac{\partial u_2^0}{\partial \nu} & \text{sur } S \end{cases}$$

En effet on prend d'abord $v \in \mathcal{D}(\Omega_0)$ et on en déduit que $-\Delta u^0 = f_0$ dans Ω_0 .

Multipliant par $v \in H_0^1(\Omega)$ et en intégrant sur Ω_0 , on obtient

$$\int_S \frac{\partial u^0}{\partial \nu} v \, ds + a_0(u^0, v) = \int_{\Omega_0} f_0 v \, dx$$

d'où en utilisant (19) \Rightarrow

$$\int_S \frac{\partial u^0}{\partial \nu} v \, ds = \int_S \frac{\partial u_2^0}{\partial \nu} v \, ds$$

La condition $u_0^0 = 0$ correspond à l'appartenance à V

Le problème (20) est un problème mêlé, avec condition de Dirichlet sur Γ et condition de Neumann sur S

Le problème (20) admet une solution unique mais ne donne aucune indication sur u_2^0 , qui va être calculé à partir de la 2^{ème} équation de (14)

Cette dernière équivaut à

$$(21) \quad -\Delta u_1^0 = 0 \quad \text{dans } \Omega_1$$

à quoi on ajoute puisque $u^0 \in H_0^1(\Omega)$

$$(22) \quad u_1^0 = u_0^0 \quad \text{sur } S$$

C'est un problème de Dirichlet dans Ω_1

c) - Calcul de u^1

On déduit de (21) et de la formule de Green que

$$-\int_S \frac{\partial u_1^0}{\partial \nu} \nu \, ds + a_1(u^0, \nu) = 0 \quad \forall \nu \in V$$

de sorte que la 1^{ère} équation de (15) (pour $j=1$) donne

$$(23) \quad a_0(u^1, \nu) = - \int_S \frac{\partial u_1^0}{\partial \nu} \nu \, ds \quad \forall \nu \in V$$

Ce qui définit u_0^1 de façon unique par

$$(24) \quad \begin{cases} -\Delta u_0^1 = 0 & \text{dans } \Omega_0^1 \\ u_0^1 = 0 & \text{sur } \Gamma \\ \frac{\partial u_0^1}{\partial \nu} = \frac{\partial u_1^0}{\partial \nu} & \text{sur } S \end{cases}$$

Puis on déduit que u_1^1 est solution de

$$(25) \quad \begin{cases} -\Delta u_1^1 = 0 & \text{dans } \Omega_1 \\ u_1^1 = u_0^1 & \text{sur } S \end{cases}$$

et ainsi de suite.

On peut aussi avoir une estimation de l'erreur lorsque l'on tronque (7)

$$\|u_\varepsilon - \left(\frac{u^{-1}}{\varepsilon} + u^0 + \varepsilon u^1 + \dots + \varepsilon^j u^j\right)\| \leq C \varepsilon^{j+1}$$

voir [19].

Imprimé en France

par

l'Institut National de Recherche en Informatique et en Automatique

